

Ein Molekülion-Atom-Stoß als Doppelspaltexperiment

Christine Wimmer

Diplomarbeit

**Institut für Kernphysik
Johann Wolfgang Goethe-Universität
Frankfurt am Main**

Frankfurt am 1.6.2004

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

1	Historie	1
1.1	Welle-Teilchendualismus des Lichts	1
1.2	Welle-Teilchendualismus auch für Materie?	1
1.3	Inhalte der Arbeit	2
2	Kinematik des dissoziativen Ladungstransfers	3
2.1	Erhaltungsgrößen des Stoßprozesses	3
2.2	Bilanz der Bindungsenergien	4
2.3	Der „Kinetic Energy Release“ KER	5
3	Zweiatomiges Molekül als Doppelspalt	7
3.1	Beugungseffekte beim Elektroneneinfang	7
3.2	Interferenzeffekte bei Molekülion-Atomstößen	7
3.3	Optischer Doppelspalt	9
3.4	Die de Broglie Wellenlänge massiver Teilchen	10
3.5	Lage der Extrema	11
4	Experimentelle Realisierung	12
4.1	Nachweis des Heliumion	12
4.2	Nachweis der Molekülfragmente	13
4.3	Detektor	14
4.3.1	MCP	14
4.3.2	Delaylineanode	15
4.4	Jet	16
4.5	Elektronik	18
4.6	Datenaufnahme	19
4.7	Datenanalyse	19
4.8	Berechnungen relevanter Größen	20
4.9	EZR-Ionenquelle	23
4.10	Energetische Zustände der Molekülionen im Strahl	25

5	Ergebnisse	26
5.1	Bestimmung des Reaktionskanals	26
5.2	Bestimmung des Kernabstandes	30
5.3	Spektren und Erläuterungen	32
6	Zusammenfassung und Ausblick	42
	Anhang: Atomare Einheiten	43
	Literatur- und Quellenverzeichnis	44

Einleitung

1 Historisches über den Welle-Teilchendualismus von Licht und Teilchen

1.1 Welle-Teilchendualismus des Lichts

In der Geschichte der Physik gab es zwei Modelle, welche die Natur des Lichtes in komplett verschiedener Weise beschrieben. Das Modell vom Licht als Welle geht auf Christiaan Huygens zurück und das Modell vom Licht als Teilchen auf Isaac Newton. Beide Modelle entstanden Mitte des 17. Jahrhunderts, und beide waren in der Lage alle grundlegende Eigenschaften des Lichtes, die bis dahin beobachtet worden waren, wie gradlinige Ausbreitung, Reflexion oder Brechung an Übergängen von Materialien mit verschiedenen optischen Dichten zu erklären. Keines der Modelle konnte verworfen werden. Das änderte sich mit einer Entdeckung von Thomas Young (1801). Er beobachtete, daß Licht beim Durchgang durch einen Doppelspalt ein Interferenzmuster erzeugt. Dies ist nur mit dem Wellenmodell von Huygens zu erklären und so schien sich dieses Modell durchgesetzt zu haben.

Der Photoeffekt wurde 1888 von Wilhelm Hallwachs beobachtet und konnte nicht mit dem zu diese Zeit akzeptierten Wellenmodell des Lichtes erklärt werden. Er konnte erst 1905 durch Einstein mit dem Teilchenmodell des Lichtes erklärt werden.

Seitdem geht man davon aus, daß Licht sowohl als Welle als auch als Teilchen in Erscheinung treten kann, abhängig von der jeweiligen Fragestellung, dem Experiment. Diese Beschreibung des Lichtes bezeichnet man als *Dualismus des Lichtes*.

1.2 Welle-Teilchendualismus auch für Materie?

Wenn das Licht sowohl Wellen- als auch Teilchencharakter besitzen kann, könnte das dann nicht auch ebenso für Materie gelten? Ausgehend von den Arbeiten Einsteins zur Dualität von Wellen- und Teilchennatur des Lichtes übertrug Luis de Broglie das Wellenmodell auf Teilchen, indem er Energie- und Impulsbeziehungen von Teilchen mit jenen aus dem Wellenbild gleichsetzte, um ein Welleneigenschaften eines Materieteilchens zu beschreiben (1924). Jedem bewegten Teilchen konnte so eine Wellenlänge zugeordnet werden, in Abhängigkeit von seinem Impuls und seiner Masse. Da dies nicht aus einer gesicherten Theorie abgeleitet werden konnte, war der experimentelle Nachweis von besonders großer Bedeutung.

Bereits kurze Zeit nachdem de Broglie seine Theorie veröffentlicht hatte, gelang Clinton Davisson und Lester Germer der experimentelle Nachweis der Welleneigenschaft von Elektronen. Sie zeigten, daß Elektronen, genau wie Röntgenstrahlen, an Kristallgittern gebeugt werden. Die experimentell bestimmte Wellenlänge und die von de Broglie berechnete stimmten genau überein [1].

Bereits 1921 beobachtete Ramsauer einen Effekt, der zunächst nicht erklärt werden konnte: Bei der Untersuchung von Stößen von langsamen Elektronen mit Edelgasen findet man ein starkes Absinken des Wirkungsquerschnittes bei bestimmten Elektronenenergien. Diese Beobachtung läßt sich nur mit der Wellennatur des Elektrons erklären. Das Minimum im Wirkungsquerschnitt tritt nämlich genau dann auf, wenn die Wellenlänge des Elektrons gleich dem Radius des Atoms ist.

Heute werden zur Untersuchung kleiner Strukturen wie Kristallen neben Röntgenstrahlung auch Elektronen oder Neutronen eingesetzt, die aufgrund ihrer geringeren Wellenlänge die Auflösung viel kleinerer Strukturen erlauben. Als eines der wichtigen Verfahren sei hierbei die Messung mit einem Elektronenmikroskop genannt.

Bei vielen Experimenten in der Atomphysik reicht eine Beschreibung im Teilchenbild aus und die Welleneigenschaft kann vernachlässigt werden. Aufgrund der kleinen Wellenlänge ist dieser Effekt auch im Alltagsleben nicht zu finden.

Heute kennt man viele Experimente, in denen sich Beugungs- und Interferenzeffekte von Elektronen und Neutronen, aber auch von ganzen Atomen zeigen. So gelang es z. B. Mlynek 1991 mit Hilfe eines Materie-Interferometers die Beugung von Helium an einem Doppelspalt nachzuweisen [2].

Interferenzeffekte wurden auch vorhergesagt bei Stößen Wasserstoffmolekülen und Protonen vorausgesagt, selbst bei einer Mittelung über alle Molekülorientierungen [3]. Dabei fällt die Rolle des Spaltes dem Molekül zu, genauer gesagt verhält es sich wie eine Blende mit zwei punktförmigen Öffnungen. Dabei wird jedes Atom des Moleküls als eine Öffnung in der Blende aufgefaßt. Das Projektil-Atom wird als einlaufende ebene Welle betrachtet, das nach Streuung am Molekül Interferenzerscheinungen in seiner Verteilung aufweist.

1.3 Inhalte der Arbeit

In der vorliegenden Arbeit wurde die Reaktion $\text{H}_2^+ + \text{He} \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{He}^+$ untersucht. Mit dem H_2^+ -Ion als Doppelspalt und dem Heliumatom als einlaufende Welle sollten Interferenzeffekte analog zum optischen Doppelspalt beobachtet werden. Die Stellung der Molekülachse wurde in der Messung bestimmt, so daß das Experiment eine Überprüfung der theoretischen Voraussage von McGuire [4] darstellt.

Diese Arbeit befasst sich zunächst mit der Kinematik der untersuchten Reaktion und überträgt die Beziehungen des klassischen optischen Doppelspaltes auf das Molekül. Es folgt die experimentelle Realisierung und anschließend die Präsentation und Diskussion der Resultate.

2. Kapitel

Kinematik des dissoziativen Elektroneneinfangs

Die Motivation zur Durchführung des Experimentes war es, eine vorausgesagte Analogie zum Doppelspalt auf molekularer Ebene [4] zu bestätigen. Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der Frage, warum der dissoziative Elektroneneinfang eine geeignete Reaktion für dieses Experiment ist und wie seine Eigenschaften in Erscheinung treten. So ist es das Ziel dieser Überlegungen die Art des Überganges, eine mögliche Anregung der Teilchen und welche elektronischen Zustände beteiligt sind von Interesse.

Untersucht wurde die Reaktion $\text{H}_2^+ + \text{He} \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{He}^+$.

Die Ergebnisse dieses Kapitels gelten durch Einsetzen der entsprechenden Massen auch für die Ionen D_2^+ und DH^+ , mit denen ebenso Messungen durchgeführt wurden. Findet bei einem $\text{H}_2^+ + \text{He}$ Stoß ein Elektroneneinfang statt, so dissoziiert das H_2 -Molekül in den meisten Fällen nicht; dissoziiert es aber, so können mit der verwendeten Meßmethode die Impulse aller drei Teilchen bestimmt werden. Insbesondere ist es hier nur möglich die Orientierung der Achse eines dissoziierten Moleküls zu messen

2.1 Erhaltungsgrößen

Im Folgenden werden die kinetischen Größen eines dissoziativen Molekülion-Atom Stoßes betrachtet.

Die *Energieerhaltung* besagt, daß die Gesamtenergie des Systems vor und nach dem Stoß gleich ist. Die Gesamtenergie berechnet sich aus der Summe aller kinetischen und Bindungsenergien (E_{kin} und E_{B}).

$$\sum_n (E_{\text{B},n}^{t1} + E_{\text{kin},n}^{t1}) = \sum_m (E_{\text{B},m}^{t2} + E_{\text{kin},m}^{t2})$$

Ebenso gilt die *Impulserhaltung*

$$\sum (\vec{p}_{\text{He}} + \vec{p}_{\text{H}_2^+}) = \sum (\vec{p}_{\text{He}^+} + \vec{p}_{\text{H}} + \vec{p}_{\text{H}})$$

Es bietet sich an, die Reaktion und damit die relevanten Energien in zwei Schritten zu behandeln. Im ersten Schritt wird zunächst die Bilanz der Bindungsenergien vor und nach dem Stoß erstellt. In einem zweiten Schritt betrachtet man die Dynamik des dissoziierenden H_2 -Moleküls. Jeder der beiden Schritte führt zu charakteristischen, experimentell bestimmbar Größen. Diese erlauben Rückschlüsse auf den Ablauf der Reaktion.

2.2 Bilanz der Bindungsenergien

Sortiert man alle Beiträge zur Gesamtenergie nach Bindungsenergien und kinetischen Energien, so erhält man die Definition von ε als Differenz aller Bindungsenergien vor (t_1) und nach (t_2) dem Stoß.

$$e = \sum_n (E_{B,n}^{t_1}) - \sum_m (E_{B,m}^{t_2}) = \sum_m (E_{kin,m}^{t_2}) - \sum_n (E_{kin,n}^{t_1}) \quad (2.3)$$

In ε geht eine Bindungsenergie, die dem System verloren geht, entgegen der allgemeinen Konvention, als ein positiver Beitrag ein. Unter der Voraussetzung, daß alle Bindungsenergien vor dem Stoß bekannt sind, erlaubt die experimentelle Bestimmung von ε eine Aussage über Anregungszustände nach der Reaktion.

In der behandelten Reaktion $H_2^+ + He \rightarrow H + H + He^+$ lauten die relevanten Bindungs- und Anregungsenergien wie folgt:

Bindungsenergie eines 1s Elektrons im Helium:	+24,6 eV
Bindung eines Elektrons an H_2^+ zu H_2	-15,5 eV
Bindungsenergie H_2 nach $H + H$	+ 4,3 eV
Anregungsenergie $H(1s)$ nach $H(2p)$	+10,2 eV
Anregungsenergie $He^+(1s)$ nach $He^+(2l)$	+40,8 eV

ε weist diskrete Werte auf, die den verschiedenen Endzuständen entsprechen. Folgende Tabelle bietet eine Übersicht über die zu erwartenden Werte für ε in den verschiedenen beobachteten Endzuständen.

Endzustand	ε
$H(1s)+H(1s) +He^+(1s)$	13,4 eV
$H(1s)+H(2p) +He^+(1s)$	23,6 eV
$H(2p)+H(2p) +He^+(1s)$	33,8 eV
$H(1s)+H(1s) +He^+(2l)$	54,2 eV

Um im zweiten Schritt die Dynamik des dissoziierenden H_2 -Moleküls zu betrachten, wird zunächst das Prinzip des Korrelationsdiagramms eingeführt.

Das Korrelationsdiagramm ist eine graphische Darstellung potentieller Energien der elektronischen Zustände eines Moleküls in Abhängigkeit des Kernabstandes. Da sich die Bindungsenergie der Zustände stetig mit dem Kernabstand ändert, sind diese Kurven im Korrelationsdiagramm. Ein Übergang von einem Zustand zu einem anderen kann innerhalb der sogenannten Franck-Condon Näherung als ein senkrechter Übergang auf eine andere Potentialkurve verstanden werden. Dies ist der Fall, wenn die Geschwindigkeit des Übergang sehr schnell ist gegenüber der Vibrationsperiode der Kerne, so daß deren Bewegung während des Überganges vernachlässigt werden kann. Die Länge der Verbindungslinie zwischen den beiden Übergangspunkten gibt die Differenz der Bindungsenergie an.

Die Potentialkurven in zwei verschiedene Klassen einordnen: Einige der Kurven besitzen ein lokales Minimum. Diese Potentialmulde ermöglicht die Existenz von bindenden Zuständen. Innerhalb dieser Mulde kann es verschiedene molekulare Schwingungszustände geben. Kurven, die kein lokales Minimum besitzen entsprechen einem nicht stabil gebundenen Molekül. Geht ein Molekül durch die Reaktion in einen dieser elektronischen Zustände über, so dissoziiert es. Aus Gründen der Energieerhaltung entspricht die Endgeschwindigkeit der Fragmente der Differenz der potentiellen Energie zum Zeitpunkt der Reaktion und der potentiellen Energie für separierte Kerne in diesem elektronischen Zustand und läßt sich direkt im Korrelationsdiagramm ablesen.

2.3 Der „Kinetic Energy Release“ (KER)

Für diese freigesetzte kinetische Energie hat sich die englische Bezeichnung „Kinetic Energy Release“ (im folgenden KER) üblich. Man erkennt, daß zwischen dem KER und dem Kernabstand der beiden Wasserstoffatome zum Zeitpunkt der Reaktion eine Abhängigkeit besteht. Bei einem kleinen Kernabstand wird mehr potentielle Energie freigesetzt, so daß die Fragmente eine größere Endgeschwindigkeit erreichen als bei einem großen Kernabstand.

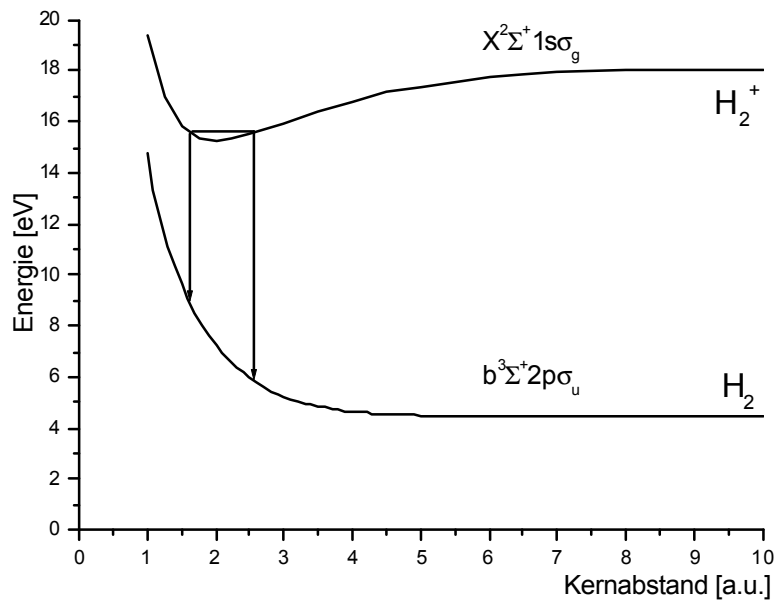


Abbildung 2.1

Im Vorgriff auf die Ergebnisse sind die beiden für den betrachteten Reaktionskanal verantwortlichen Potentialkurven dargestellt. Es sind zwei Übergänge aus einem gebundenen Zustand der H_2^+ -Kurve auf die dissoziative H_2 -Kurve dargestellt.

[6]

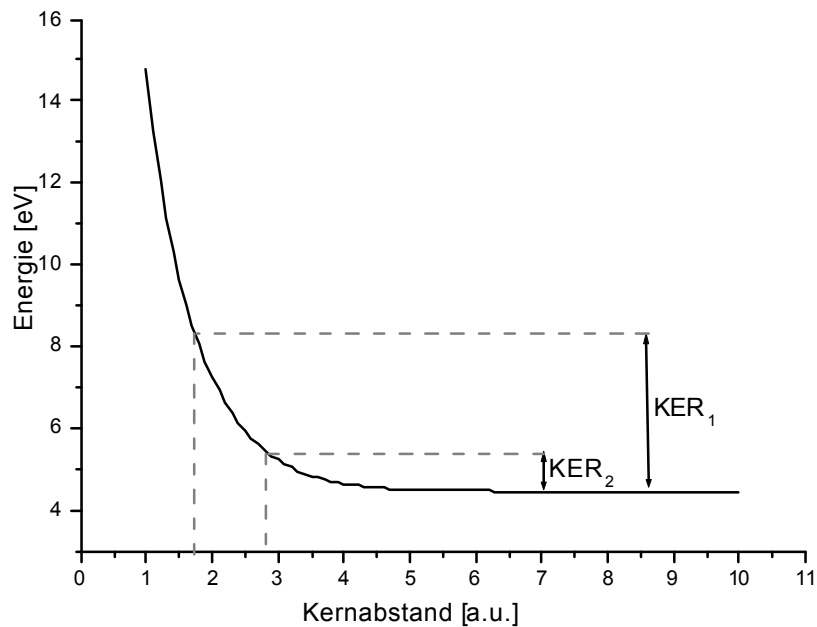


Abbildung 2.2

Verdeutlichung des Zusammenhanges zwischen Kernabstand und KER

[6]

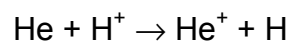
3. Kapitel

Interferenzeffekte in Ion – Atom und Molekülion – Atom Stößen

Interferenzen entstehen ganz allgemein, wenn verschiedene Möglichkeiten, wie eine Prozess ablaufen kann, sich kohärent überlagern können. Es gibt hierbei die Möglichkeit der Überlagerung von Reaktionen an verschiedenen Orten, aber auch eine Interferenz durch verschiedene Zeitpunkte der Reaktion.

3.1 Elektroneneinfang

Beim Elektroneneinfang



tritt eine kohärente Überlagerung von Reaktionen zu verschiedenen Zeitpunkten auf. So ist es möglich, daß der Transfer des Elektrons während der Annäherung oder der Entfernung des Projektils von Target geschieht. Dieser Effekt wurde wiederholt beobachtet und ist auch in der Theorie vollständig verstanden.

3.2 Interferenzeffekte bei Molekülion-Atomstößen

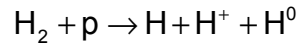
Beim Elektroneneinfang aus einem Molekül besteht neben dem zuvor beschriebenen Elektroneneinfang zwischen Ionen und Atomen zusätzlich die Möglichkeit einer kohärenten Überlagerung zwischen verschiedenen Reaktionsorten, da ja der Elektroneneinfang an jedem der Atome möglich ist. Es stellt sich die Frage, ob ein direktes Analogon zum optischen Doppelspalt auf molekularer Ebene zu erwarten ist, und dies durch eine Messung experimentell bestätigt werden kann.

Eine frühe Veröffentlichung [2], die sich mit dieser Frage beschäftigt, behandelt den Ladungstransfer von einem H₂-Molekül bei der Reaktion mit einem Proton. Allerdings wurde lediglich der Wirkungsquerschnitt bei einer Mittelung über alle Orientierungen des Moleküls betrachtet.

Viel ausgeprägtere Interferenzen sind in dem Fall zu erwarten, wenn man eine feste Stellung der Molekülachse betrachtet, wie es der Theoretiker J. H. McGuire in einer Veröffentlichung von 1988 [4] beschreibt. Er behandelt die Berechnung von Wirkungsquerschnitten für oben die genannte Reaktion für eine feste Orientierungen der Molekülachse. Das Modell, das seinen Rechnungen zugrunde liegt, besteht im wesentlichen aus der Überlagerung zweier Kugelwellen, die von den Streuzentren ausgehen. Dies zeigt, daß dieser Prozess wie ein Doppelspaltexperiment betrachten läßt.

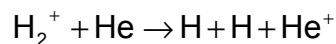
Eine der Herausforderungen bei der experimentellen Überprüfung dieser Rechnungen besteht darin, die Orientierung der Molekülachse entweder vor der

Reaktion durch Ausrichtung zu präparieren oder sie zu messen. Mit den in der Arbeitsgruppe gegebenen Möglichkeiten ist es einfacher, die Molekülachse zu messen, nachdem das Molekül dissoziiert ist. Ein mögliches Experiment ist die Untersuchung der Reaktion



Dies kann realisiert werden, indem man einen Überschallgasjet mit H_2 betreibt und mit einem Protonstrahl aus dem Beschleuniger kreuzt. Dabei wird vom H_2 -Molekül ein Elektron entfernt, es dissoziiert und ein Fragment und das umgeladene Projektil werden nachgewiesen. Die Impulsverteilung des durch die Reaktion abgelenkten Projektils sollte für feste Orientierungen der Molekülachse Interferenzen aufweisen. Dieses Experiment wurde im Rahmen der Diplomarbeit von Jasmin Titze [5] durchgeführt.

In dieser Arbeit jedoch wurde eine andere Reaktion betrachtet, die wesentlich weniger intuitiv mit der Vorstellung des Doppelspalt zu verbinden ist.



Im Vergleich zum zuvor beschriebenen Versuch sind dabei die Rollen des Projektils und des Targets getauscht. Im Laborsystem fliegt also der Spalt auf das quasi ruhende Atom zu. Hier ist die Analogie zum Doppelspalt nur im Molekülsystem zu erkennen. Von ihm aus gesehen bewegt sich das Heliumatom mit derselben Geschwindigkeit, mit der sich das H_2^+ im Laborsystem bewegt. Diese Betrachtungsweise des Stoßes vom Molekülsystem aus wird *als inverse Kinematik* bezeichnet.

3.3 Optischer Doppelspalt

In diesem Absatz wird nun die Theorie des Doppelspaltes aus der Optik beschrieben, die dann auf das Molekül angewendet wird.

Auf zwei parallele Spalte im Abstand d zueinander fällt eine ebene Welle, mit der Wellenlänge λ . Man beobachtet dahinter eine Abfolge von Minima und Maxima, die sich als Interferenz der einfallenden Welle verursacht durch die beiden Spalte ergibt.

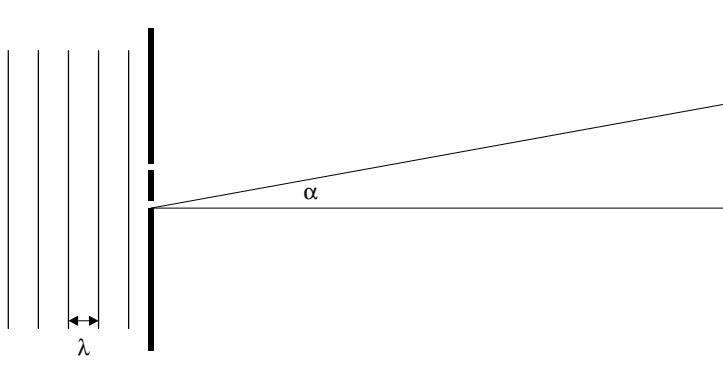


Abbildung 3.1

Definition des Winkels α

Minima liegen vor, wenn $\sin \alpha_n = \pm n \frac{\lambda}{d}$ $n = 1, 2, 3, \dots$ erfüllt ist.

Maxima liegen vor, wenn $\sin \alpha_n = \pm \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda}{d}$, $n = 1, 2, 3, \dots$ erfüllt ist.

Dem Abstand d der Spalte entspricht dem Abstand der beiden Wasserstoffkerne, welcher typischerweise zwischen 1,4 a.u. und 3 a.u. beträgt.

3.4 De Broglie Wellenlänge massiver Teilchen

Ausgehend von der Deutung des Photoeffektes mit der Teilchennatur des Lichtes, was die damals akzeptierte Vorstellung von der reinen Wellennatur des Lichtes veränderte, stellte de Broglie die Vermutung auf, daß ebenso auch Teilchen einen Wellencharakter besitzen können.

Ein Photon der Wellenlänge λ besitzt die Energie E
(Lichtgeschwindigkeit c , Planksches Wirkungsquantum h)

$$E = h \frac{c}{\lambda}$$

Mit der Einsteinschen Beziehung $E=mc^2$, wobei m die effektive Masse des Elektrons ist, erhält man die Beziehung

$$mc^2 = h \frac{c}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{h}{mc}$$

Nach de Broglie besitzt nicht nur ein Photon mit der Lichtgeschwindigkeit c eine Wellenlänge, sondern auch jedes andere Teilchen, das sich mit der Geschwindigkeit v bewegt.

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Die de Broglie Wellenlänge des Heliumatoms im hier betrachteten Experiment ist somit

$$\lambda = \frac{h}{m_{\text{He}} v}$$

Aufgrund der Interpretation des Stoßes in inverser Kinematik ist die Geschwindigkeit des Moleküls im Laborsystem jene Geschwindigkeit, mit der das Heliumatom sich auf den Spalt zubewegt. Für die vorrangig betrachtete Messung von H_2^+ bei 10 keV Beschleunigungsspannung beträgt $v=0,449 \text{ a.u.} = 9,822773 \cdot 10^5 \text{ m/s}$

Die Wellenlänge des He-Atoms beträgt $\lambda = 0,0019 \text{ a.u.} = 1,0 \cdot 10^{-13} \text{ m}$

3.5 Lage der Extrema

Nach den vorausgegangenen Betrachtungen ist es nun möglich, die erwartete Lage der Extrema im Impulsraum zu berechnen. Es zeigt sich, daß deren Lage abhängig vom internuklearen Abstand der Kerne im Molekül, jedoch unabhängig von der Projektilgeschwindigkeit ist, obwohl diese in die de Broglie Wellenlänge eingeht und damit die Lage der Extrema beeinflussen sollte.

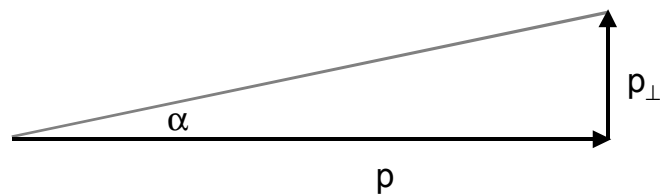


Abbildung 3.2

Man betrachtet die Interferenzstruktur im Impuls p_{\perp} , den das Projektil senkrecht zu seinem Impuls p in Bewegungsrichtung hat. p und p_{\perp} bilden ein rechtwinkliges Dreieck, in dem man einen Winkel α zwischen p und der Richtung nach der Streuung definiert. α entspricht dem Streuwinkel, also dem Winkel um den das Projektil abgelenkt wurde.

Wendet man die Bedingung für Maxima und Minima auf das eben beschriebene Dreieck aus p und p_{\perp} an, so erhält man

$$\text{für Maxima } \frac{p_{\perp}}{p} = \pm n \frac{\lambda}{d} \quad \text{und für Minima } \frac{p_{\perp}}{p} = \pm \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda}{d}.$$

Mit Einsetzen von $p = m_{\text{He}} v$ und $\lambda = h / m_{\text{He}} v$ und Auflösen nach p_{\perp} erhält man

$$\text{für Maxima } p_{\perp} = \pm n \frac{h}{d} \quad \text{und für Minima } p_{\perp} = \pm \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{h}{d}.$$

Man erkennt, daß die Geschwindigkeit des Projektils herausfällt, sie deshalb keinen Einfluss auf die Lage der Extrema hat.

4. Kapitel

Experimentelle Realisierung

Eine Messung des Systems erfolgt durch eine koinzidente Messung des He^+ -Ions und der zwei Wasserstoffatome. Das ionisierte Target, im weiteren als Rückstoßion bezeichnet, wird mittels eines elektrischen Feldes auf einen Detektor projiziert. Die Kenntnis des Reaktionsortes, der Flugzeit und der Geometrie des Feldes erlauben die Bestimmung des übertragenen Impulses. Die beiden Wasserstoffatome werden auf einem zweiten Detektor orts- und zeitauflösend nachgewiesen. Zunächst wird nun die Messung des Rückstoßions betrachtet.

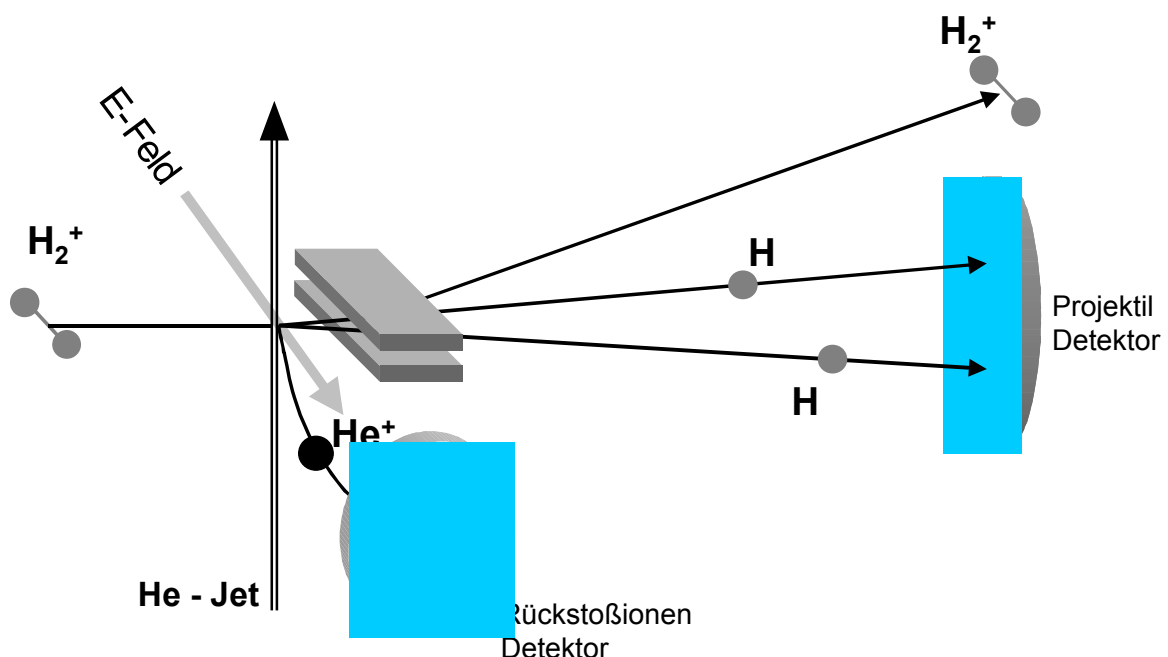


Abbildung 4.1 Schematische Darstellung des Experimentes

4.1 Nachweis des Rückstoßions

Der Nachweis des Rückstoßions wird mit COLTRIMS vorgenommen. COLTRIMS steht für *COLd Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy*.

Das Ion geht mit einem bestimmten Impulsvektor aus der Reaktion hervor, wobei der Ort der Reaktion bekannt sein muß. Der Reaktionsort befindet sich in einem Bereich, in dem ein elektrisches Feld bekannter Geometrie herrscht. Dieses Feld bildet die Ionen auf dem Detektor ab. Aus dem Ort des Auftreffens läßt sich der Impuls des Ions zur Zeit der Reaktion rekonstruieren. Die Erzeugung des elektrischen Feldes wird durch parallel angeordneten Kupferplatten realisiert, an die eine Spannung angelegt wird. In der Reaktionszone herrscht eine elektrische Feldstärke von etwa 20 V/cm.

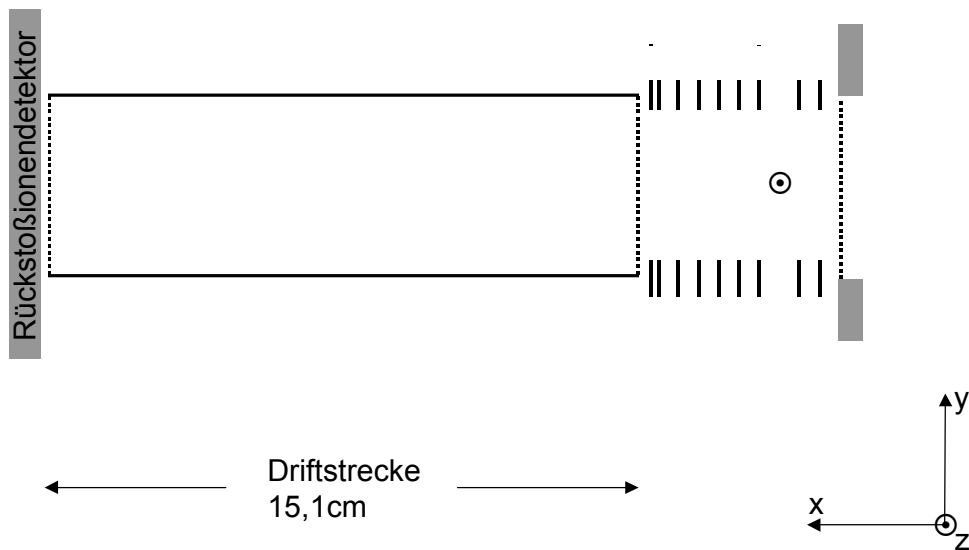


Abbildung 4.2 Schematische Darstellung des Spektrometers

4.2 Nachweis der Molekülfragmente

Da die beiden Fragmente des Wasserstoffmoleküls neutral sind, werden sie nicht durch das elektrische Feld des Spektrometers beeinflusst. Der Schwerpunkt des Moleküls erhält durch den Stoß, zusätzlich zu seinem durch die Projektilgeschwindigkeit gegebenen Impuls, einen Impulsübertrag. Der Impulsübertrag in Richtung der z-Achse kann vernachlässigt werden. Neben dieser Schwerpunktsbewegung bewegen sich auch die beiden Fragmente relativ zum Schwerpunkt. Durch die Dissoziation bewegen sie sich in Richtung der ehemaligen Molekülachse voneinander weg. Die Zeit von der Reaktion bis zum Auftreffen auf dem Detektor ist erheblich größer als der Zeitraum, in dem die Fragmente durch die Dissoziation noch eine beschleunigende Kraft erfahren. Dies erlaubt die Annahme, die Fragmente hätten im Augenblick des Aufbruches ihre komplette Endgeschwindigkeit aus der Dissoziation erhalten. Auf dem Detektor werden die beiden Fragmente orts- und zeitauflösend nachgewiesen. Aus dem Auftreffort der einzelnen Fragmente und der Zeit zwischen dem Auftreffen lassen sich die Endgeschwindigkeit der Fragmente und der Winkel θ zwischen der Molekülachse und der z-Achse bestimmen. Aus dem Auftreffort des Schwerpunktes läßt sich der Impulsübertrag errechnen.

4.3 Detektor

Der Nachweis der Teilchen auf beiden Detektoren funktioniert nach dem selben Prinzip. Das Teilchen trifft auf ein MCP, das eine Elektronenwolke erzeugt. Diese Elektronenwolke trifft auf einen ostssensitiven Delaylineanodendetektor.

4.3.1

Micro Channel Plate (MCP)

Ein MCP ist eine dünne Platte mit wabenförmigen Kanälen, die schräg durch die Platte führen. Legt man eine Spannung zwischen Vorder- und Rückseite des MCPs an und trifft nun ein Teilchen - Ionen, Elektronen oder auch neutrales Teilchen auf den Detektor auf, so werden an der Oberfläche des MCPs Elektronen ausgelöst, die vom elektrischen Feld in die Kanäle hineingesogen werden und an der Oberfläche der Kanalwände wiederum Elektronen auslösen. Dadurch wird die eintreffende Ladung vervielfacht. Ein weiteres MCP bewirkt eine zusätzliche Verstärkung. Es entsteht eine Elektronenwolke auf der anderen Seite des MCPs an dem Ort, wo die Ladung auftraf. Die Erzeugung der Elektronenwolke bewirkt, daß die Hochspannung zwischen Vorder- und Rückseite des MCPs kurzzeitig einbricht. Dieses Signal wird kapazitiv ausgekoppelt und dient als Zeitpunkt für das Auftreffens des Teilchens.

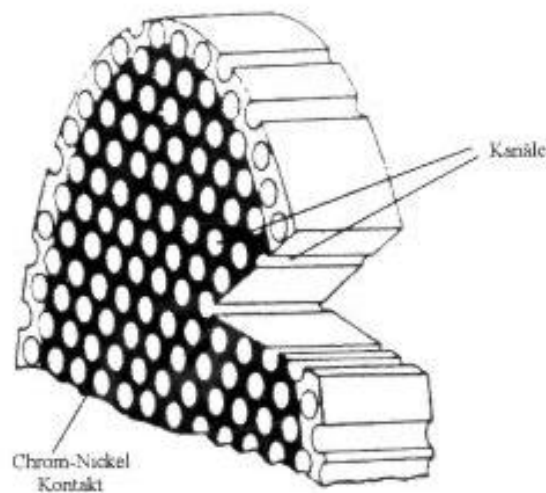


Abbildung 4.3 Schematische Darstellung eines MCP, [7]

4.3.2 Delaylineanode

Die Aufgabe der Delaylineanode ist es die auftreffende Elektronenwolke in ein Ortsinformation umzuwandeln.

Die Delaylineanode besteht aus zwei Ebenen von jeweils zwei Drähten, die um eine rechteckige Grundplatte gewickelt werden. An den Kanten der Grundplatte ist eine Keramik mit feinen Rillen angebracht, wobei zwei der gegenüberliegenden Keramiken breiter sind als die anderen beiden. Der erste Draht wird so gewickelt, daß er durch jede zweite Rille der schmaleren Keramik führt, der zweite Draht durch die freigelassene dazwischen. Mit der zweiten Ebene senkrecht dazu wird genauso verfahren. Keiner der Drähte darf einen elektrischen Kontakt zu einem anderen haben. Zum Betrieb des Detektors werden die Drähte auf verschiedene Potentiale gelegt: Je ein Draht aus jeder Ebene auf ein Potential von ca. 150V (Signaldraht), der andere etwas niedriger auf etwa 100 V (Referenzdraht). Da zwischen den beiden Drähten einer Ebene ein Potentialunterschied besteht, werden die Elektronen bevorzugt auf den Signaldraht gesogen. Etwaige kapazitive Störsignale werden von beiden Drähten gleichmäßig aufgenommen, so daß eine Verbesserung der Signalqualität durch die Differenz der Signale von Signal- und Referenzdraht erreicht wird.

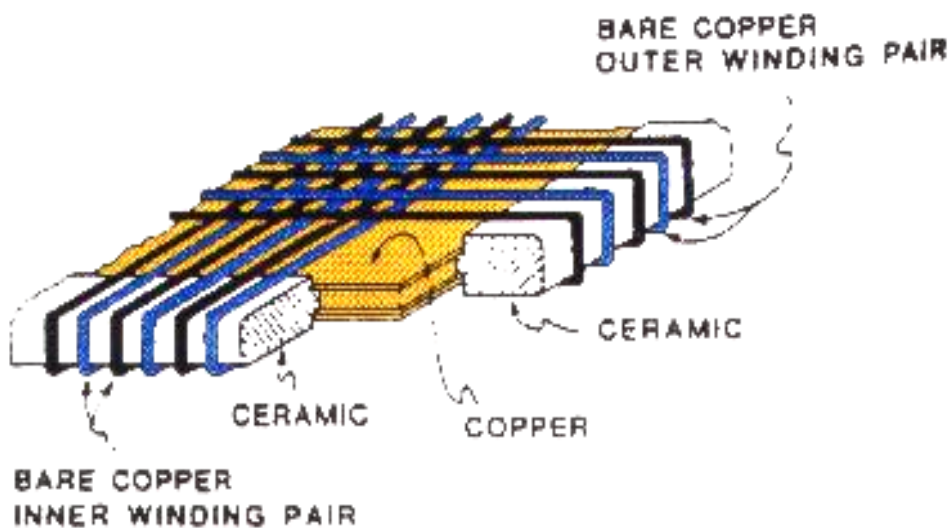


Abbildung 4.4 Delaylineanode [8]

4.4 Jet

Als Target mit dem der Molekülstrahl aus der Quelle gekreuzt wird, wird ein Jet verwendet.

Die Anforderungen an das Target:

- gute Lokalisierung in Strahlrichtung
- hohe Dichte
- geringe thermische Energie innerhalb des Jets. Die thermische Bewegung der Teilchen im Jet muß gegen den auf das Target übertragenen Impulse zu vernachlässigen sein.

Das Reaktionsvolumen, in dem sich Strahl und Jet kreuzen, soll klein sein damit der Startort für alle Ereignisse möglichst gleich ist. dies ist insbesondere für die Genauigkeit der Bestimmung der Impulse des Rückstoßions von großer Bedeutung. Gleichzeitig muß die Dichte in diesem Ort hoch genug sein, um eine ausreichend hohe Reaktionsrate zu erzielen.

In diesem Experiment ist das Target durch einen zweistufigen Überschallgasjet realisiert. Helium wird bei Raumtemperatur und einem Druck von 17 bar durch eine Düse von 30µm expandiert. Dabei wird die freie Enthalpie des Gases in eine gerichtete Bewegung umgewandelt. In einem räumlich begrenzten Volumen bewegen sich die Atome sehr gerichtet und praktisch ohne Stöße (Zone of Silence). Durch Stöße mit dem Restgas in der Expansionskammer ist dieser Bereich begrenzt. Innerhalb dieses Volumens selektiert ein Skimmers einen kleinen Anteil der Atome mit der sehr gerichteten Bewegung und läßt sie in die zweite Jetstufe, in dem ein wesentlich besseres Grundvakuum herrscht. Auch hier selektiert wieder ein Skimmer aus dem Atomstrahl einen noch besser lokalisieren Atomstrahl mit weniger Divergenz für die Reaktionskammer.

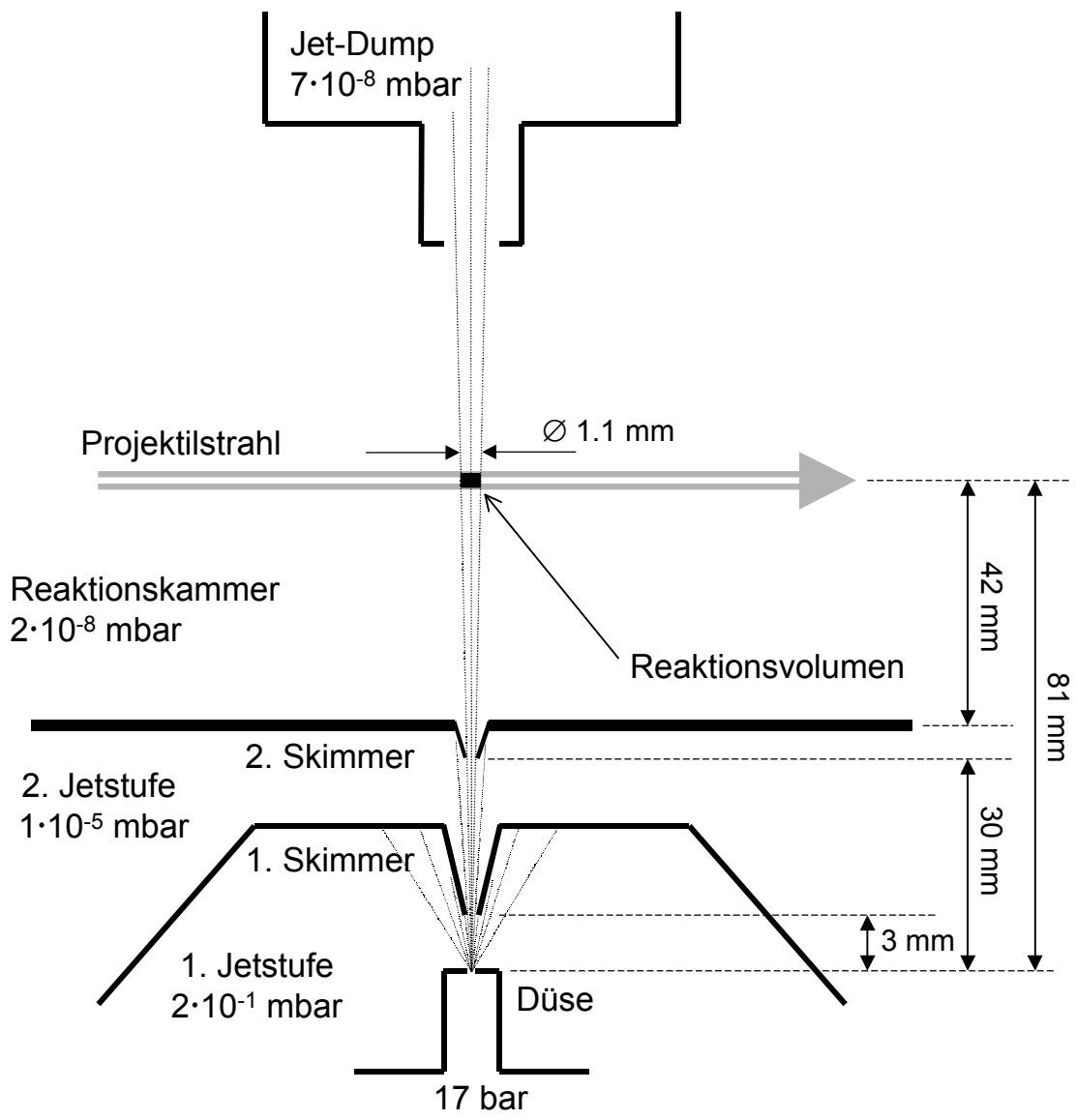


Abbildung 4.5 Schematisch: zweistufiger Jet [9, Abb. 3.3]

4.5 Elektronik

Die Signale der Delaylineanode werden, wie zuvor beschrieben, kapazitiv ausgekoppelt und die Differenz aus Signal- und Referenzdraht verstärkt. Für jedes Layer der Anode werden zwei Signale erzeugt, pro Detektor also vier. Das MCP erzeugt ein Zeitsignal. Mit dem MCP-Signal des Projektildetektors mit einem Gate und Delay-Signal erzeugt. Tritt während der Dauer dieses Signals das Zeitsignal des MCPs des Rückstoßionendetektors auf, so löst dies ein Signal, das einem logischen „und“ der beiden MCP Signale entspricht, den Common-Stop aus. Dieser bewirkt, daß die Signale aller Kanäle, die vom TDC aufgezeichnet werden, für einen gewissen Zeitraum vor dem Eintreffen des Common-Stop-Signales an einen PC übertragen und dort gespeichert werden. Der festgelegte Zeitraum vor dem Common-Stop-Signal soll so gewählt sein, daß in dieser Zeit alle MCP- und Anodensignale in den TDC geschrieben wurden.

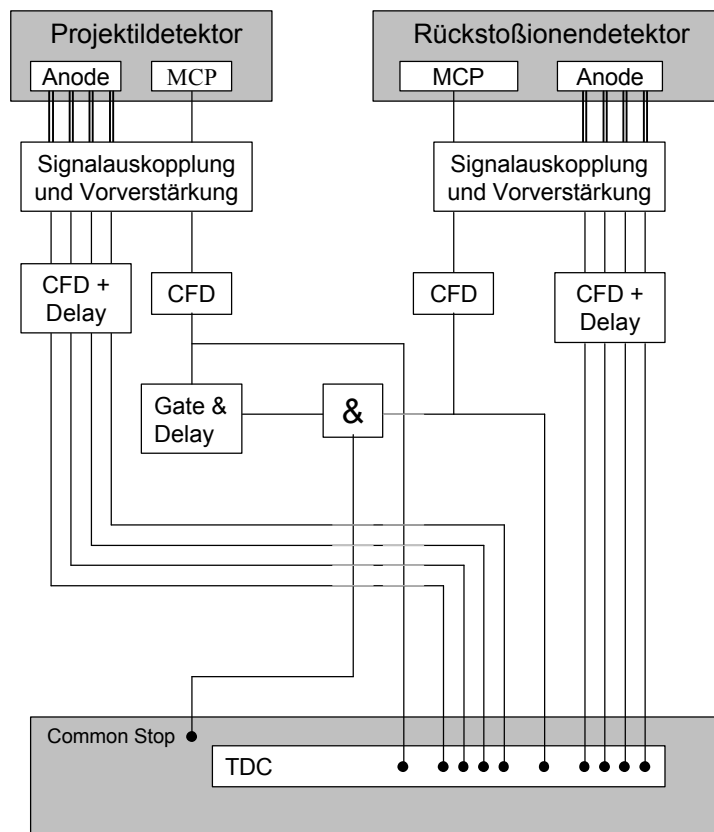


Abbildung 4.6 Signalwege und Logik der Schaltung

4.6 Datenaufnahme

Für ein Ereignis werden in Idealfall folgende Größen gespeichert:
für das Rückstoßion:

Zeitsignal des MCP als Stoppsignal für Common-Stop
x-Richtung: zwei Laufzeiten in Delaylineanode
y-Richtung: zwei Laufzeiten in Delaylineanode

für die Projektile:
erstes Fragment

Zeitsignal des MCP
x-Richtung: zwei Laufzeiten in Delaylineanode
y-Richtung: zwei Laufzeiten in Delaylineanode

zweites Fragment

Zeitsignal des MCP
x-Richtung: zwei Laufzeiten in Delaylineanode
y-Richtung: zwei Laufzeiten in Delaylineanode

4.7 Datenanalyse

Die so gewonnenen Informationen über das Ereignis werden mit einem Fortranprogramm weiterverarbeitet, dessen Funktion hier nun kurz wiedergegeben sei.

Vor der Analyse der Daten werden zuvor definierte Parameter eingelesen, die für jedes Ereignis gelten. Dies sind Werte wie beispielsweise die Masse der Molekülfragmente, Projektilgeschwindigkeit, Laufzeit eines Pulses auf der Delaylineanode und ähnliches.

Für die Aufbereitung eines einzelnen Ereignisses werden zunächst alle Daten dieses Ereignisses in ein Array geschrieben. Es wird dann überprüft, ob die Anzahl der erfassten Signale und deren zeitliche Lage eine vollständige Rekonstruktion des Ereignisses prinzipiell erlauben. Anschließend wird aus allen Signalen alle möglichen Einzelereignisse erzeugt, aus denen dann ein Molekül rekonstruiert wird unter Berücksichtigung von Bedingungen, die für ein Molekül gelten müssen.

Wurde ein Molekül erkannt, so werden charakterisierende Größen für das Ereignis berechnet und das auf diese Weise aufbereitete Ereignis ausgegeben.

4.8 Berechnung einiger relevanter Größen

Hier soll die Berechnung des KERs und des Winkels θ veranschaulicht werden. Aus Gründen der Einfachheit sei hier angenommen, die Dissoziation des Moleküls finde in der z-x-Ebene statt. Teichen 1 ist zum Zeitpunkt der Reaktion dem Detektor zugewandt.

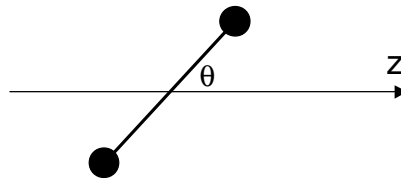


Abbildung 4.7

Definition von θ als Winkel zwischen Molekülachse und z-Achse

l_z	Driftstrecke Reaktionszone-Detektor
θ	Winkel zwischen Molekülachse und z-Richtung
v_z	Geschwindigkeit in z-Richtung, Projektilgeschwindigkeit
v_{KER}	Endgeschwindigkeit eines Fragmentes relativ zum Schwerpunkt
t_{of}	Flugzeit (time of flight)

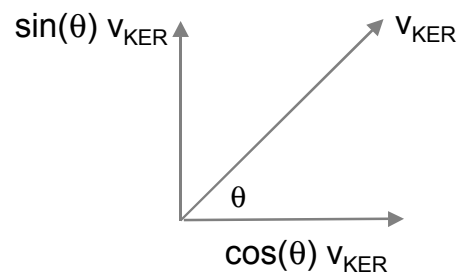


Abbildung 4.8

Zerlegung der Dissoziationsgeschwindigkeit

Geschwindigkeit in z-Richtung

$$v_{z1} = v_z + v_{KER} \cos(\theta)$$

$$v_{z2} = v_z - v_{KER} \cos(\theta)$$

Geschwindigkeit in x-Richtung

$$v_{x1} = v_{KER} \sin(\theta)$$

$$v_{x2} = v_{KER} \sin(\theta)$$

Auftrefforte :

$$x_1 = v_x t_{of1}$$

$$x_2 = v_x t_{of2}$$

Flugzeiten: $t_{of1} = \frac{l_z}{v_{z1}}$ $t_{of2} = \frac{l_z}{v_{z2}}$

Der Nachweis beider Fragmente ist eine Aufgabe, die eine experimentelle Herausforderung. In Abhängigkeit von der Stellung der Molekülachse zur z-Achse gibt es zwei Situationen, die besonders schwierig sind. Zum einen ist dies eine Stellung der Molekülachse senkrecht zu z-Achse ($\theta=90^\circ$). In diesem Fall treffen beide Fragmente praktisch zur selben Zeit auf dem Detektor auf. Der andere Extremfall ist die Stellung des Moleküls in Richtung der z-Achse ($\theta=0^\circ$), wenn die beiden Fragmente am selben Ort auftreffen. Man erkennt, daß auch genau dies die beiden Situationen sind, bei denen die wenigsten Ereignisse rekonstruiert werden können.

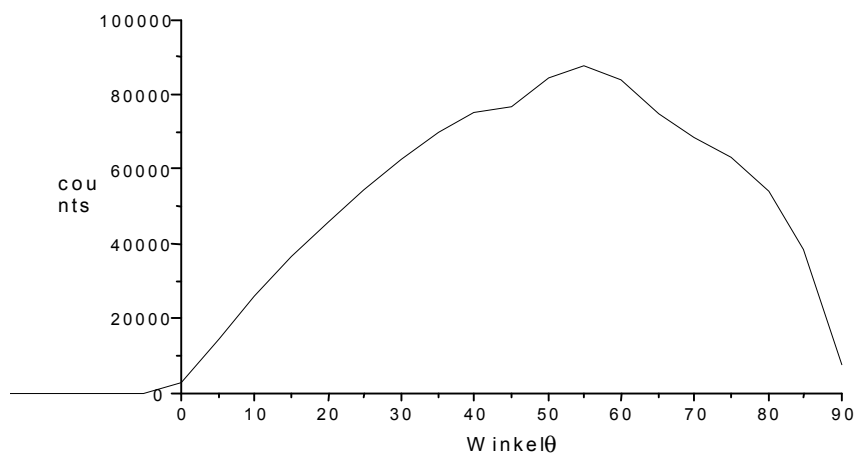


Abbildung 4.9

Häufigkeit der erfassten Winkel q

Wie oben beschrieben kann der KER aus dem Auftreffort und dem zeitlichen Abstand, in dem die Fragmente auf dem Detektor auftreffen, experimentell bestimmt werden. Die Größe ϵ kann durch eine Messung nicht direkt bestimmt werden. Es ist aber möglich den Energieverlust des Projektilschwerpunktes experimentell zu bestimmen. Diese Größe wird als Q-Wert bezeichnet und setzt sich in fast allen hier betrachteten Reaktionen wie folgt zusammen (der Sonderfall wird an entsprechender Stelle behandelt):

$$Q = -(\epsilon + KER)$$

Die Bestimmung des Q-Wertes aus dem Energieverlust des Projektilschwerpunktes lässt sich erreichen über folgenden Zusammenhang: [9, Formel 2.5 bis 2.12]

(m_e Elektronenmasse).

$$p_{z,rec} = -\frac{Q}{v_p} - \frac{v_p m_e}{2}$$

Die Größe $p_{z,rec}$ lässt sich aus dem Auftreffort des Rückstoßions auf dem Detektor bestimmen. Stellt man obige nach Q frei, so ergibt sich:

$$Q = - \left(p_{z,rec} v_p + \frac{v_p^2 m_e}{2} \right)$$

Die Messung von ε erfolgt also über die Messung von des Q-Wertes und des KER.
Es gilt:

$$\varepsilon = \text{KER} - Q$$

4.9 Die EZR-Ionenquelle

Erzeugung von HH^+ , DD^+ und HD^+ in der EZR-Ionenquelle

Eine EZR-Ionenquelle [10,11] erzeugt Ionen mittels eines heißen Plasmas.

Die Quelle ist aufgebaut aus einer Vakuumkammer, in welche eine Mikrowelle fester Frequenz eingestrahlt wird, ein Einlaßsystem für das Quellengas, einem Spulenpaar, welches eine magnetisches Spiegelfeld für den axialen Plasmaeinschluß erzeugt, einem Multipolmagneten(hier ein Hexapol) für den radialen Plasmaeinschluß und einer negativ gepolten Scheibe (*biased disk*), welche axialen Elektronenverluste reduziert.

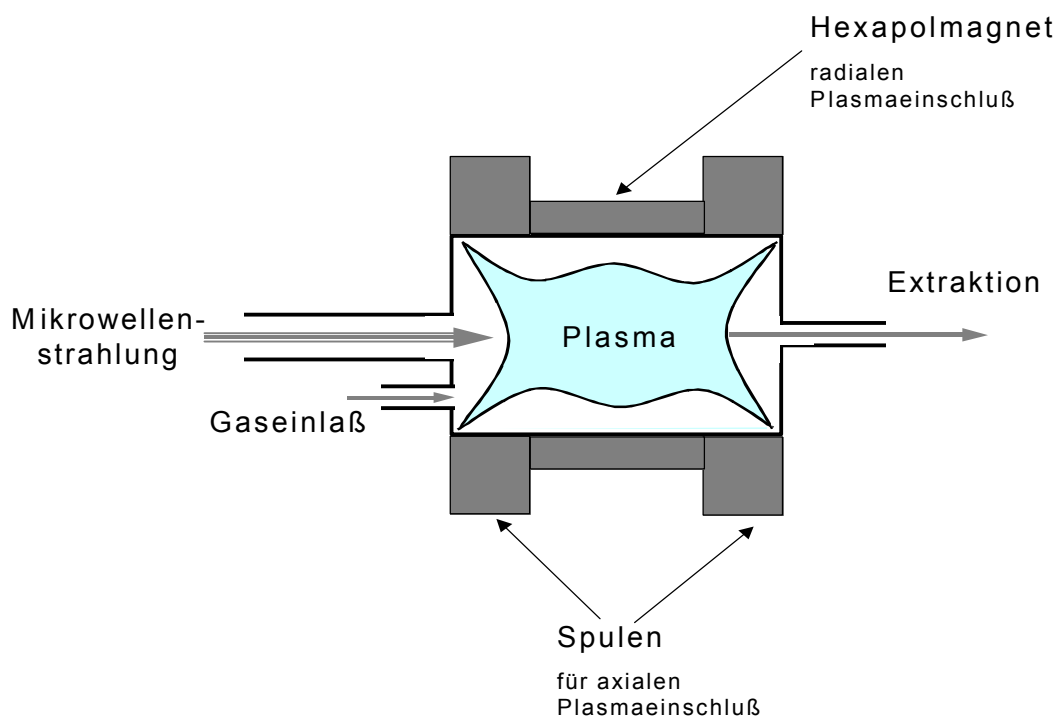


Abbildung 4.10 Schematische Darstellung EZR

Auf das in die Vakuumkammer eingelassene Gas oder einem Gasmisch wird Mikrowellenstrahlung der Frequenz ω_{mw} eingestrahlt. Durch Stöße der Gasteilchen untereinander ist immer ein geringer Anteil des Gases kurzzeitig ionisiert. Durch das starke elektrische Feld, das die Mikrowellenstrahlung erzeugt, werden freie Ladungen beschleunigt, aufgrund ihrer sehr viel höheren Masse erfahren Ionen nur eine geringe Geschwindigkeit, die leichten Elektronen hingegen eine große. Die beiden Spulenkomponenten erzeugen ein Magnetfeld einer definierten Struktur, der sogenannten Minimum-B-Struktur in der Plasmakammer. Diese Magnetfeldstruktur ist dadurch gekennzeichnet, daß vom geometrischen Mittelpunkt der Plasmakammer die magnetische Induktion B in alle Richtungen ansteigt. Ziel dieser

Magnetfeldstruktur ist ein Einschluß der Plasmaelektronen durch das Prinzip des magnetischen Spiegels.

Die Kombination aus Magnetfeld und eingestrahelter Mikrowelle erlaubt eine besonders effektive Beschleunigung der Elektronen, wenn die sogenannte Elektron-Zyklotron-Resonanzbedingung erfüllt ist. Darunter versteht man, daß die Gyrationfrequenz der Elektronen ω_{zyk} um die Magnetfeldlinien gleich der eingestrahlten Mikrowellenstrahlung ω_{mw} ist. In diesem Fall ist eine besonders effektive Heizung der Elektronen gegeben. Die Frequenz der Mikrowellenstrahlung muß daher so gewählt sein, daß die sogenannte Elektron-Zyklotron-Resonanzbedingung für Elektronen im Plasma erfüllt ist. Da das Magnetfeld eine in alle Richtungen ansteigende Induktion besitzt, ist diese Bedingung immer auf einer geschlossenen Oberfläche erfüllt. Ionen werden aufgrund ihrer Masse nicht aufgeheizt, sie behalten ihre thermische Geschwindigkeit bei. Atome und Ionen durch wiederholte Einfachionisation zu hochgeladenen Zuständen ionisiert werden. Wie zuvor gesagt, Elektronen werden durch die Magnetfeldstruktur am verlassen des Plasmas gehindert. Ionen hingegen werden in das Plasma eingeschlossen aufgrund der Anziehungskraft der Elektronen, so daß das Plasma als ganzes neutral bleibt. Für die Erzeugung des HD^+ -Strahles macht man sich zusätzlich den Effekt zunutze, daß im Plasma auch neue Moleküle gebildet werden können. So wurde ein Gemisch aus H_2 und D_2 in die Quelle gefüllt. Im heißen Plasma wurden diese Moleküle aufgebrochen und es konnte sich HD und HD^+ bilden.

Der Einschluß des Plasmas ist aber nicht perfekt, so daß Elektronen insbesondere in axialer Richtung aus dem Plasma entweichen können. Da das Plasma als ganzes dazu tendiert neutral zu bleiben, werden Ionen hinterhergesogen. Durch gezieltes anlegen einer Extraktionsspannung und eine geeignete Geometrie können so Ionen aus der Quelle extrahiert werden. In einem Analysiermagneten wird aus den extrahierten Ionen die gewünschte Masse zu Ladungsverhältnis selektiert.

Die Erzeugung von nur einfach geladenen Ionen und Molekülionen ist nicht eine der Hauptanwendungsgebiete von EZR-Ionenquellen. Diese Art von Quellen wird normalerweise zur Erzeugung hochgeladener Ionen verwendet, so daß die Erzeugung von nur einfachgeladenen Molekülionen eher eine ungewöhnliche Anwendung darstellt.

4.10 Energetische Zustände der Moleküle im Strahl

Wie durch die Erzeugung der Ionen im heißen Plasma leicht ersichtlich, müssen die Moleküle eine Vielzahl von Schwingungs- und Rotationsanregungen besitzen. Die Zustände besitzen in Relation zur Zeit bis zur Reaktion eine hohe Lebensdauer. Auch eine Abregung durch Stöße innerhalb des Strahls kann aufgrund dessen geringer Dichte nicht vermutet werden, so daß davon ausgegangen werden kann, daß sich die Moleküle zum Zeitpunkt der Reaktion in einem angeregten Zustand befinden. Allerdings befinden sich alle Moleküle bei der Reaktion im elektronischen Grundzustand, denn keiner der anderen Zustände ist langlebig genug, um den Reaktionsort zu erreichen. Das Vorhandensein von vibronischen Anregungszuständen führt zum kleineren und größeren Kernabständen, die sich aus dem beobachteten KER bestimmen lassen sollten.

Kapitel 5

Ergebnisse

5.1 Bestimmung des Reaktionskanals

Wie schon zuvor beschrieben ist es wichtig einem bestimmten Reaktionskanal in der Auswertung zu betrachten. Daher gilt der erste Abschnitt des Kapitels Ergebnisse der Bestimmung des Reaktionskanals.

Da zu werden nun zunächst die experimentell ermittelten ε -Werte mit den errechneten Werten der Endzustände verglichen.

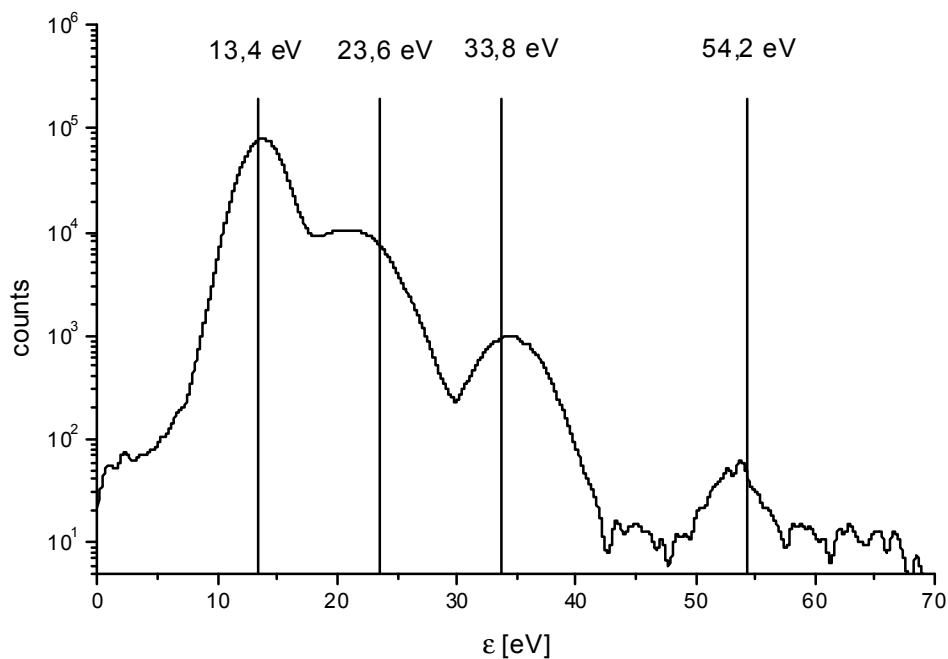


Abbildung 5.1

Experimentell bestimmte Werte für ε im Vergleich mit dem errechneten ε

Man erkennt deutlich, daß die Maxima der experimentell ermittelten ε -Werte zu den Werten der errechneten Ausgangskanäle passen.

Die Abhängigkeit der beiden Größen voneinander lässt sich am besten in einer zweidimensionalen Darstellung wiedergeben.

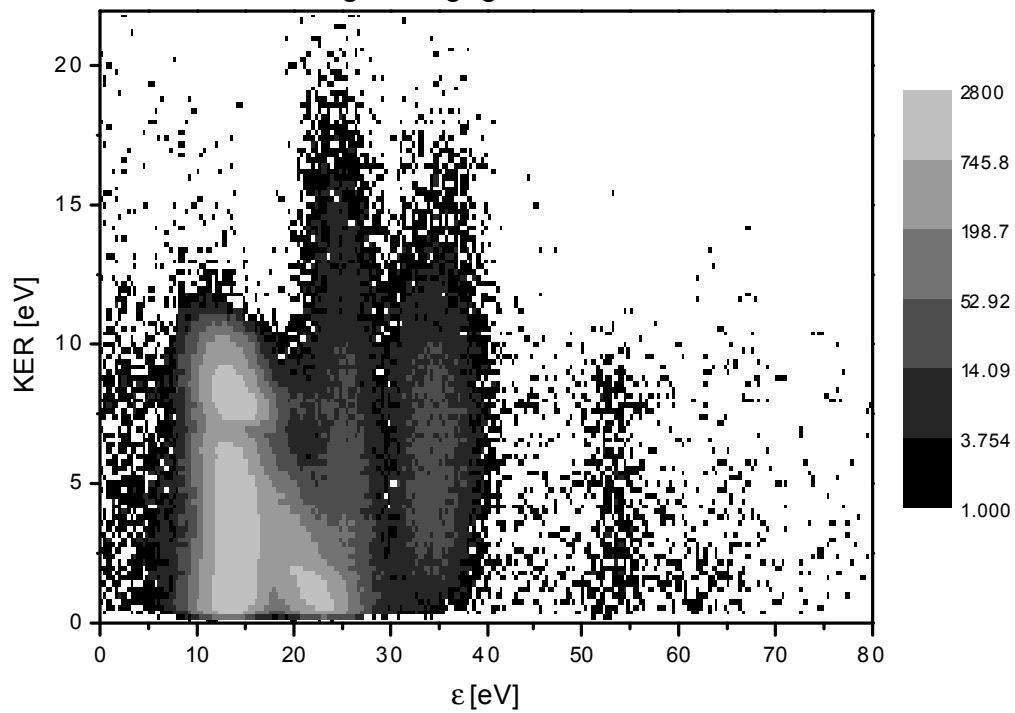


Abbildung 5.2 e/KER Diagramm

In dieser zweidimensionalen Darstellung erkennt man verschiedene Bereiche, die verschiedene angeregte Zuständen der Teilchen erkennen.

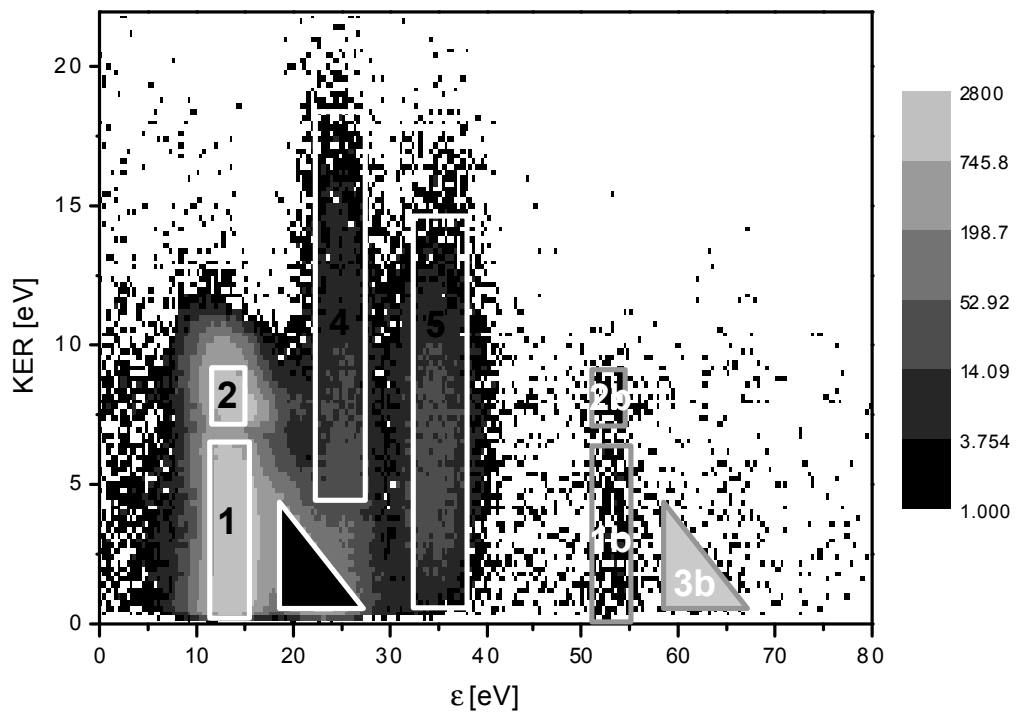


Abbildung 5.3 Kennzeichnung der Endkanäle

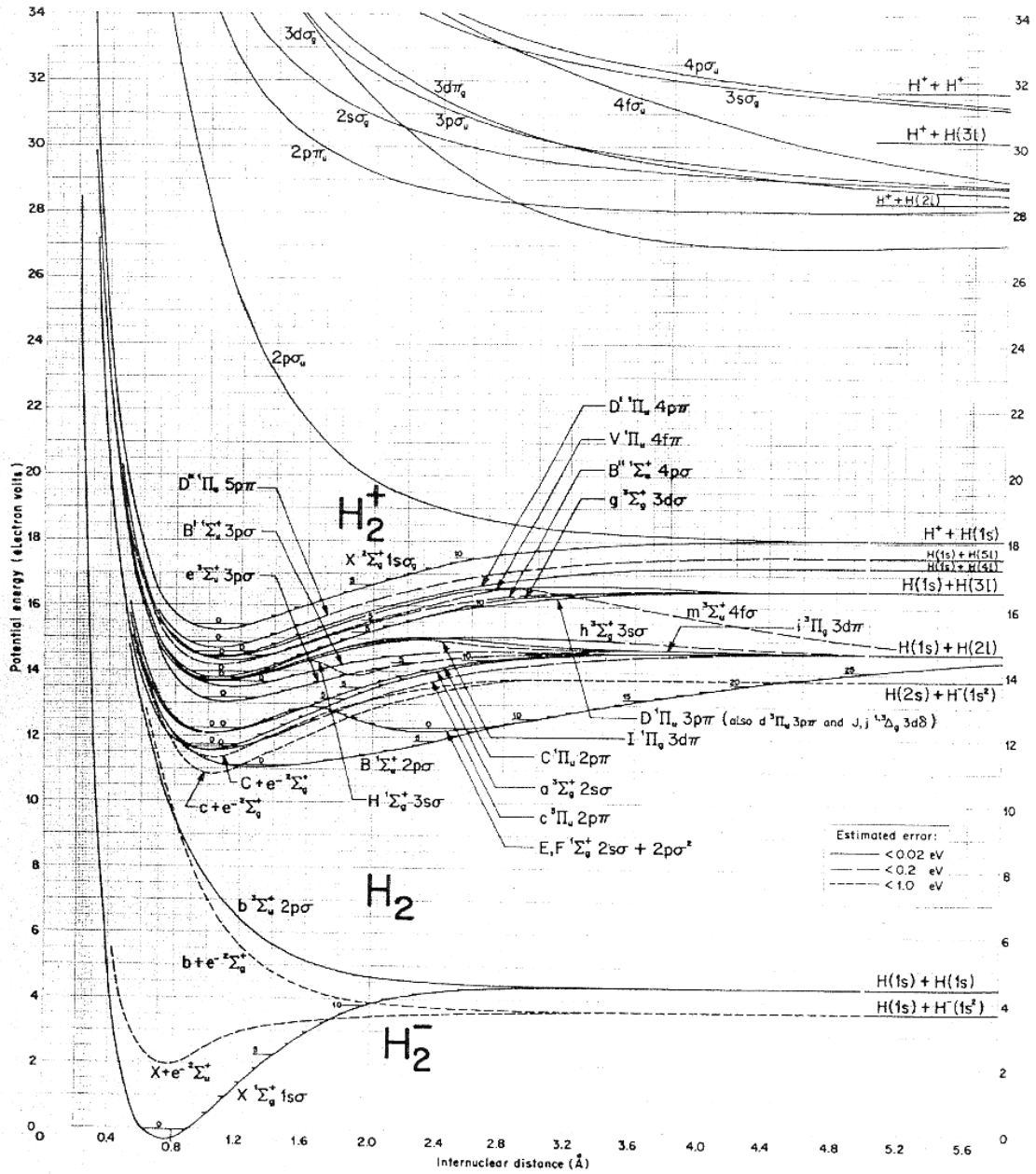


FIG. 2. Potential-Energy Curves for H_2^+ , H_2 , and H_2^-
 A large-scale pullout of this drawing appears at the front of this issue
 In general $1s\sigma$ has been omitted from state designations in order to save space

Abbildung 5.4 Potentialkurven für H_2^+ , H_2 und H_2^-
 Quelle: T. E. Sharp, Atomic Data 2, 119-169 (1971)

Bereich 1

In diesem Bereich liegen die Ereignisse, die direkt von $H_2^+(1\sigma_g)$ nach $H_2(2p\sigma_u)$ in $H(1s)+ H(1s)+ He^+(1s)$ übergegangen sind.

Aus der Breite der Verteilung des KER lässt sich ein Rückschluss auf die Vibrationsanregung machen. Der beobachtete KER von etwa 0.5 eV bis 6.5 eV lässt auf einen Kernabstand von H_2^+ einem Kernabstand von 1.4 au bis 3.0 au schließen.

Bereich 2

In diesem Bereich liegen die Ereignisse, die, wie der Bereich 1, in $H(1s)+ H(1s)+ He^+(1s)$ übergegangen sind. Allerdings findet dieser Übergang nicht direkt statt, sondern über metastabile Zwischenzustände von $H_2^+(1\sigma_g)$ nach $H_2(2p\sigma_u)$. Damit ist die Differenz der Bindungsenergien gleich, allerdings haben die Metastabilen nur die Möglichkeit bei kleinen Kernabständen zu zerfallen, was zu einem größeren KER führt.

Bereich 3

Auch die Ereignisse in diesem Bereich zerfallen in über metastabile Zwischenzustände. Hier emittiert das H_2 -Molekül ein Photon beim Übergang nach $H_2(2p\sigma_u)$. Da die Energie des Photons nicht aus dem Energieverlust des Projektils berechnet werden kann, fehlt sie in der Bilanz und dieser Kanal weist einen zu hohen ϵ - Wert auf. Hier erfolgte die Berechnung der Q-Wertes nicht korrekt, da die fehlende Energie des Photons nicht berücksichtigt wurde.

Bereich 4, Bereich 5

Hier findet die Dissoziation über andere nicht bindende Zustände statt.

Bereich 1b, Bereich 2b, Bereich 3b

Diese drei Bereiche werden durch die selben Übergänge wie die Bereiche 1, 2 und 3 erzeugt, mit dem Unterschied, daß das Heliumion angeregt aus der Reaktion hervorgeht.

5.2 Bestimmung des Kernabstandes aus dem KER für den Bereich 1

Wie zuvor besprochen gibt es für den Prozess, der für den Bereich 1 zuständig ist, einen eindeutigen Zusammenhang zwischen dem KER und dem Kernabstand. Der KER lässt sich im Korrelationsdiagramm ablesen als Differenz der potentiellen Energie beim Kernabstand der Reaktion zu jener separierter Kerne.

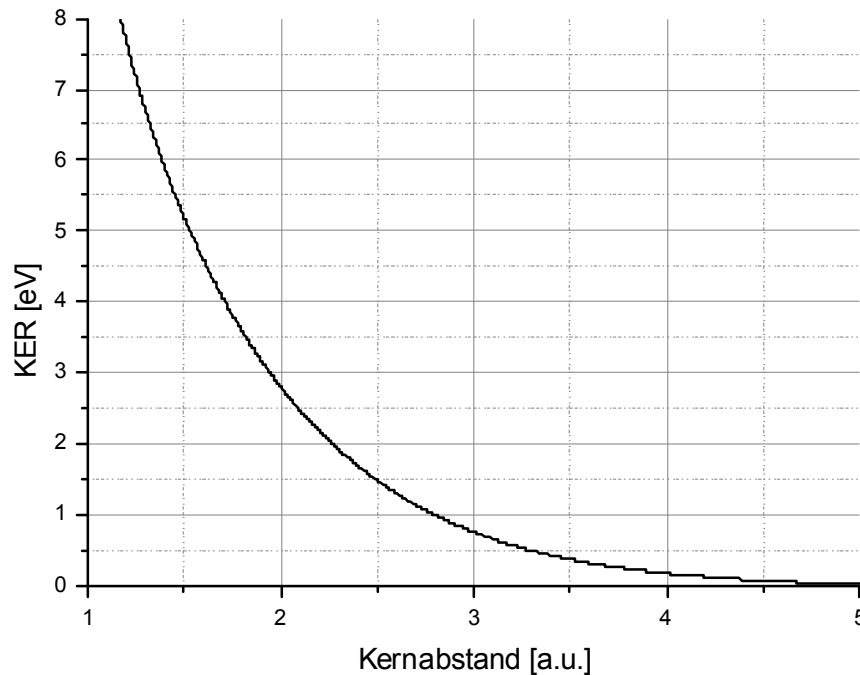


Abbildung 5.5 Potentialkurve des $2p\sigma_u$ Zustandes. [6] Betrachtet wird nur der für die Reaktionen in Bereich 1 relevante Bereich. Der Nullpunkt der Energie ist so gewählt, daß sie dem Dissoziationslimit entspricht.

Der in der Reaktion betrachtete Bereich 1 weist KER-Werte von 0,3 eV bis 6,5 eV auf. Wie sich im Bild oben erkennen lässt umfasst das einen Bereich von Kernabständen von 1.35 bis 3.45. Um Effekte verschiedener Kernabstände besser beobachten zu können, ist es nötig kleinere Bereiche im KER und damit des Kernabstandes zu betrachten. Zu kleine Bereiche des KER verschlechtern die Statistik. Hier muß ein Kompromiss zwischen kleinen Bereichen im KER, die den Abstand der Kerne besser beschreibt und größeren Bereichen mit besserer Statistik getroffen werden. Ein Kompromiss wurde getroffen in der die Unterteilung des KER in drei etwa gleich große Bereiche.

kleiner KER:	0,3 eV bis 2,3 eV
mittlerer KER:	2,3 eV bis 4,4 eV
großer KER:	4,4 eV bis 6,5 eV

Bevor nun aus dem Kernabstand und der Wellenlänge des Projektils die Lage der Extrema der Doppelspaltinterferenzen hergeleitet wird, wird nun im Vorgriff auf die Ergebnisse begründet, warum die Minima dort im beobachteten Interferenzmuster auftreten, wo man beim optischen Doppelspaltexperiment ein Maximum beobachten würde und umgekehrt.

Durch den gewählten Ausgangskanal ist der elektronische Übergang exakt festgelegt, und da er immer von einem graden in einen ungraden Zustand geschieht, muß, um die Paritätserhaltung nicht zu verletzen, eine Phasenverschiebung von π stattfinden.

Welche Bereiche des KERs entsprechen welchen Kernabständen?

Aus der Kurve abgelesene Werte für die drei gewählten Bereiche des KER

In jedem der drei Bereiche befindet sich eine vergleichbare Statistik. Man erkennt, das für kleine Kernabstände die Extrema weiter auseinander liegen. Somit bietet der Bereich mit einem KER von 0,3 a.u. bis 6,2 a.u. einen weiteren Abstand der Extrema bei ähnlicher Statistik.

KER [eV]	d [au]	1. Maximum	1. Minimum	2. Maximum	2. Minimum
6,5	1,3	2,42	4,83	7,25	9,67
4,4	1,65	1,90	3,81	5,71	7,62
2,3	2,15	1,46	2,92	4,38	5,84
0,3	3,55	0,88	1,77	2,65	3,54

5.3 Spektren und Erläuterungen

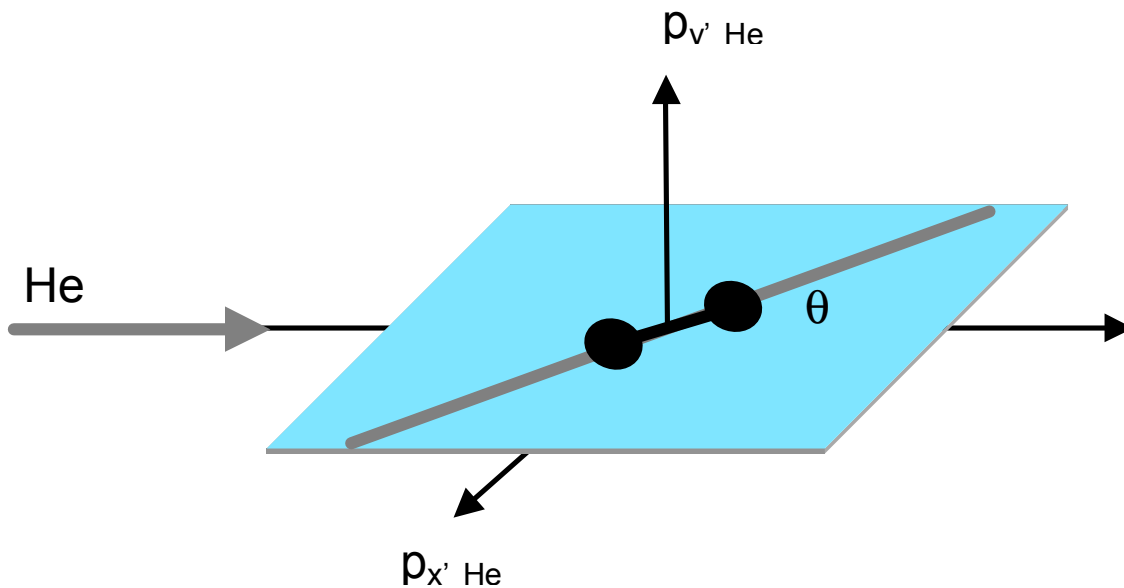


Abbildung 5.6

Definition des Winkels θ und der Richtungen des gestreuten Heliums

Molekülachse senkrecht auf Strahlrichtung

Dieser Fall entspricht dem klassischen Doppelspalt. Um zu testen, ob die beobachtete Struktur tatsächlich mit dieser Annahme zu erklären ist wird nun geprüft, ob die Berechnungen des Doppelspaltes mit dem Experiment übereinstimmt. Dies heißt im wesentlichen, ob die Abstände der Minima und Maxima korrekt wieder gegeben wird. An dieser Stelle macht man sich die Abhängigkeit des KERs vom Kernabstand zunutze. Betrachtet man alle KER, so sollten die Maxima breit und ausgewaschen sein, da man praktisch einen Doppelspalt mit verschiedenen breiten Spaltabständen betrachtet.

Gezeigt werden nun die Ergebnisse. Dargestellt wird die Richtung, in die das Heliumion nach dem Stoß abgelenkt wird. Zur besseren Ausnützung der Statistik wurde in dieser Darstellung auf das setzen von Bedingungen auf den Kernabstand verzichtet. Zwar würde das eine bessere Trennung von Maxima und Minima erlauben, doch wird die Anschauung durch eine Herabsetzung der Statistik stärker behindert. Die Bedingung auf verschiedene Bereiche des KER wird nur in Projektionen verwendet.

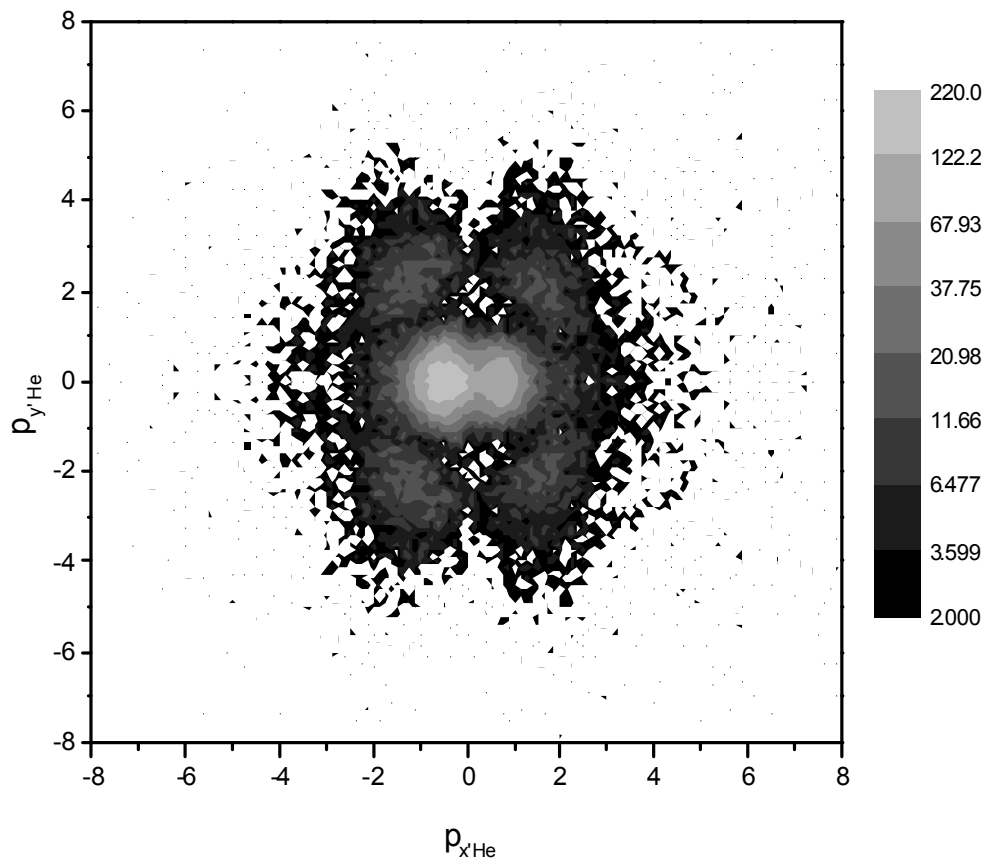


Abbildung 5.7

q : 80° bis 90°

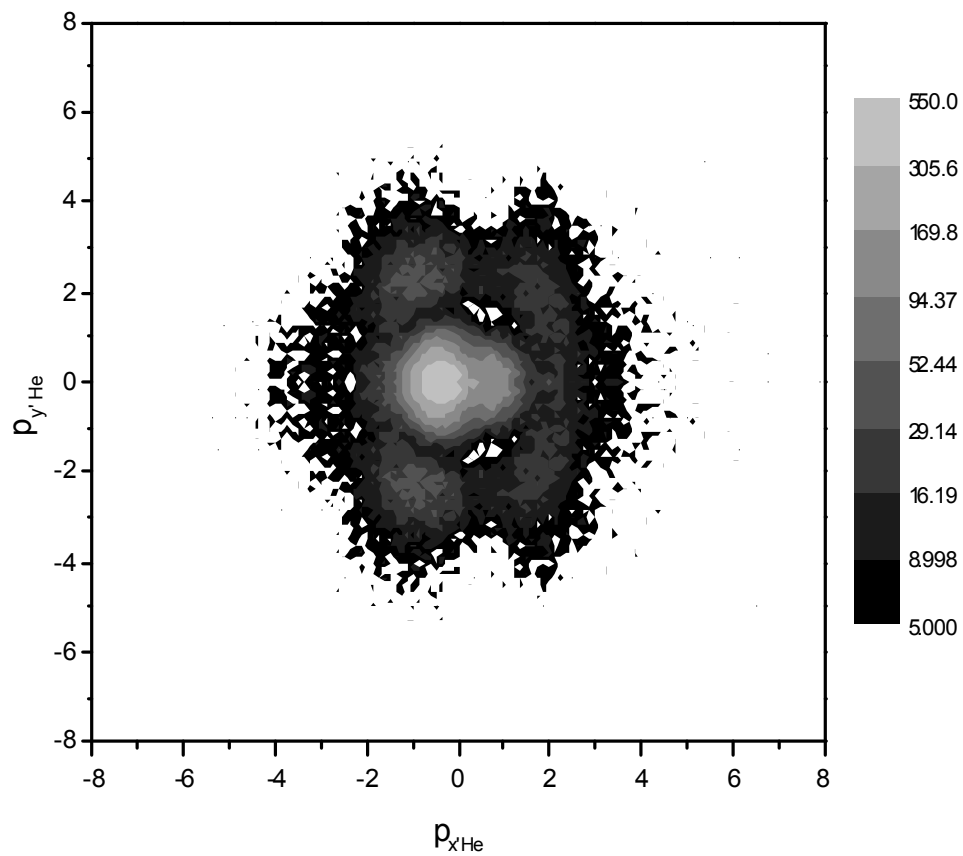


Abbildung 5.8 q : 70° bis 80°

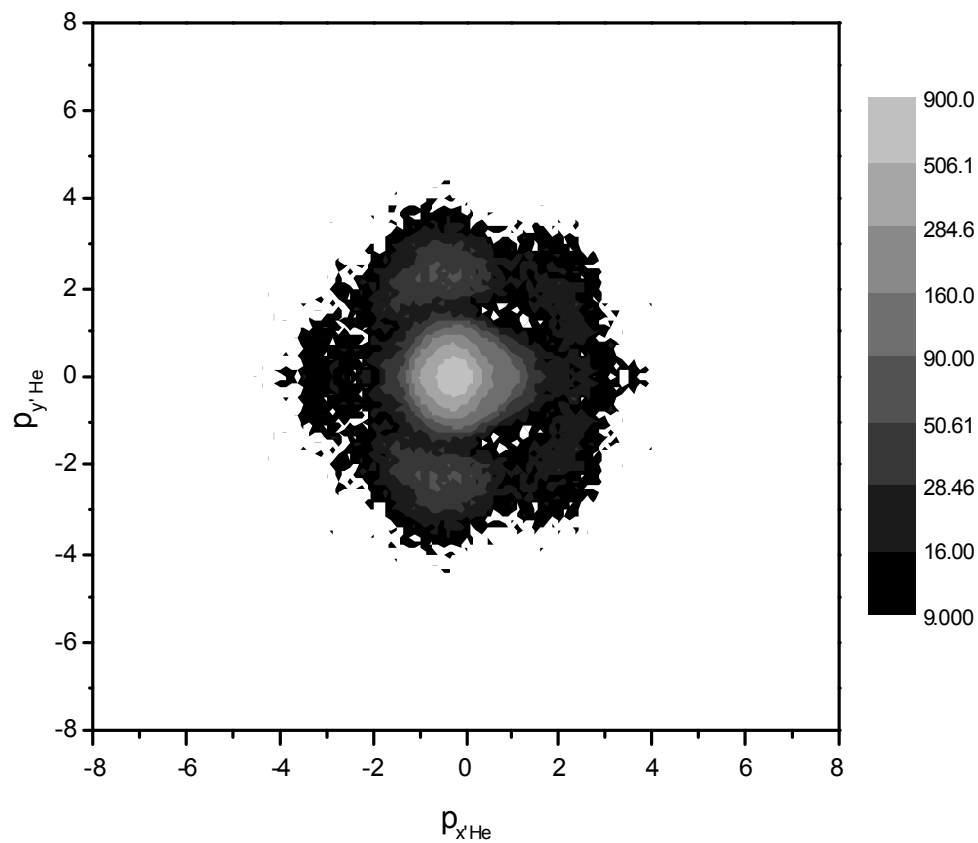


Abbildung 5.9 q : 60° bis 70°

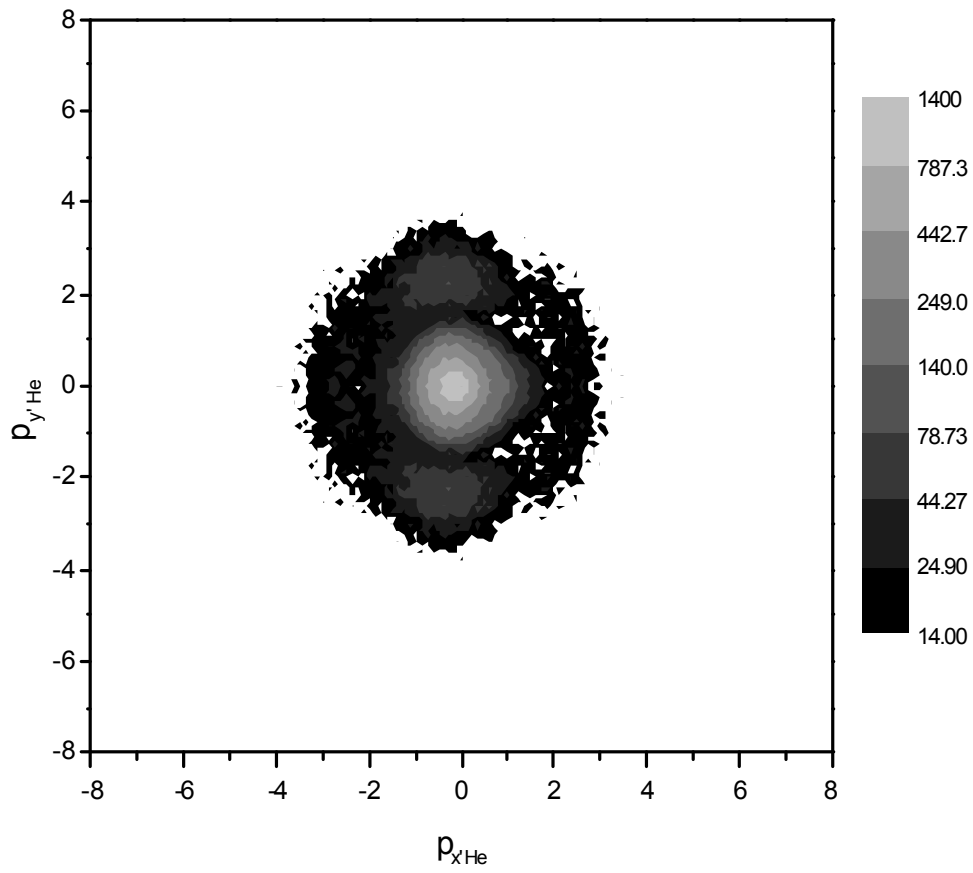


Abbildung 5.10 q : 50° bis 60°

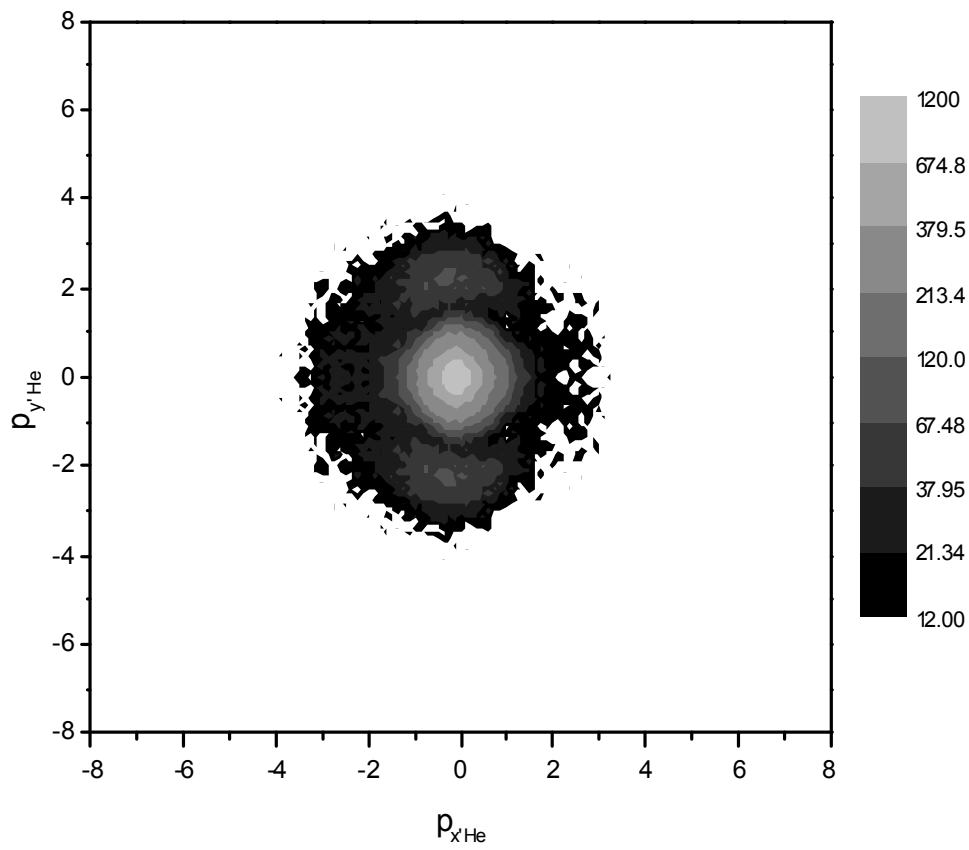


Abbildung 5.11 q : 40° bis 50°

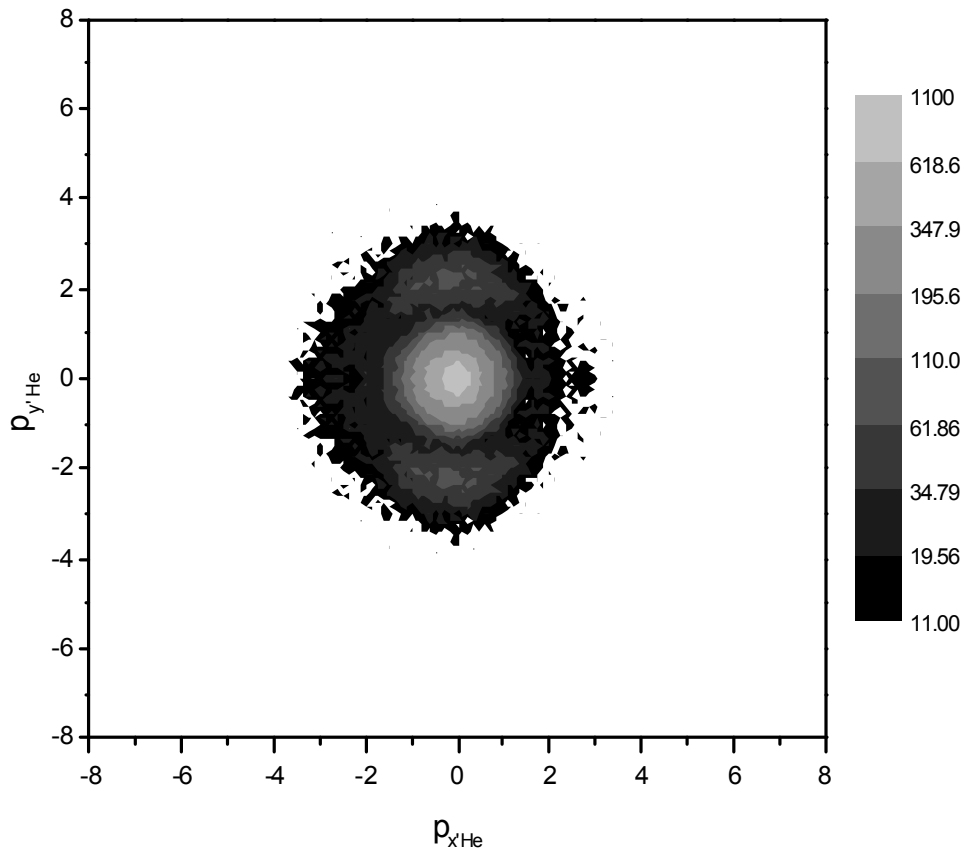


Abbildung 5.12: q : 30° bis 40°

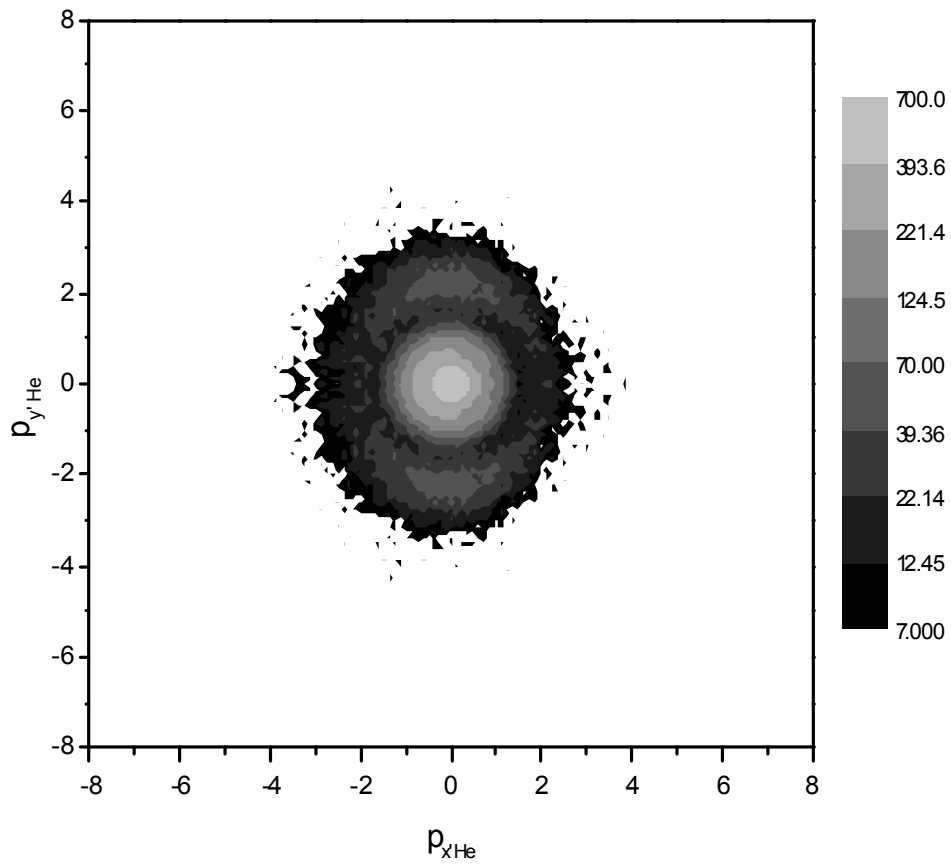


Abbildung 5.13 q : 20° bis 30°

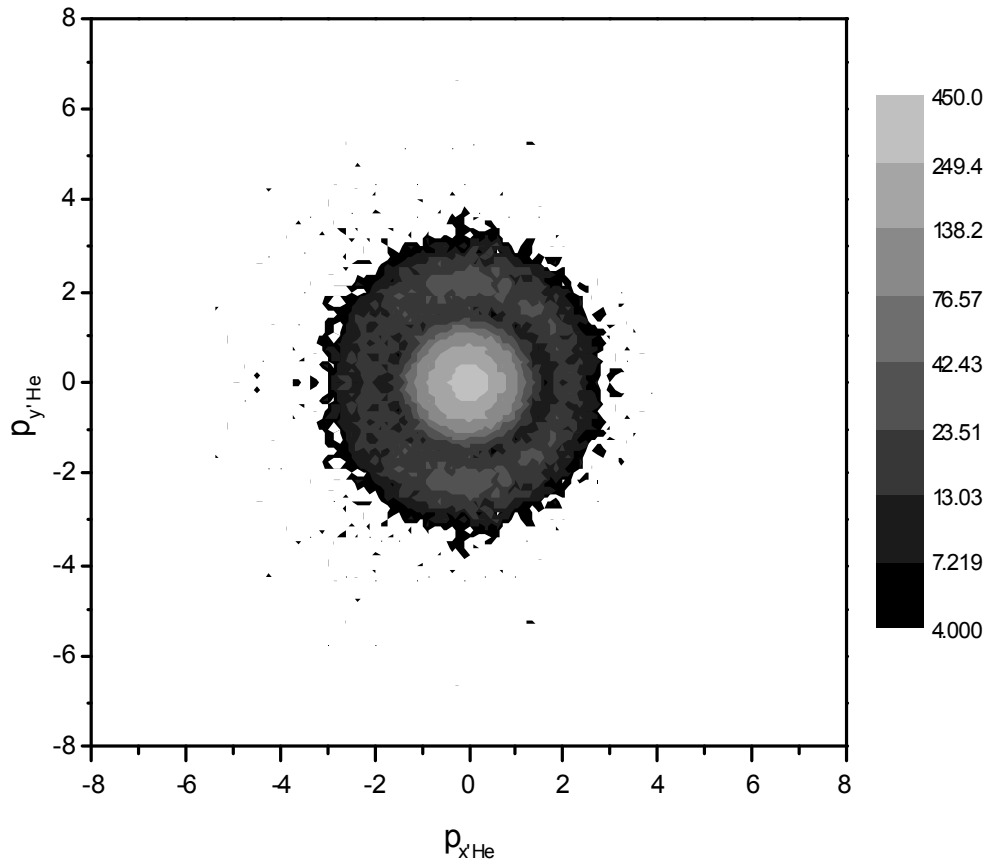


Abbildung 5.14 q : 10° bis 20°

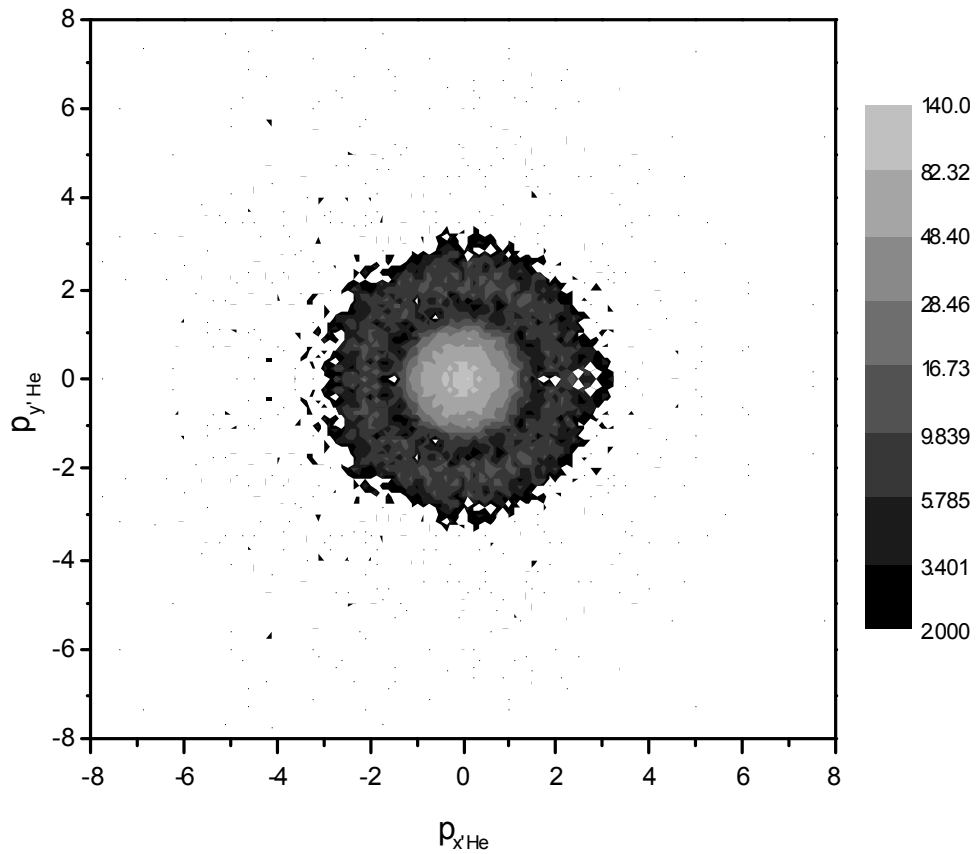


Abbildung 5.15 q : 0° bis 10°

Impulsverteilung des Heliumions in der x'/y' -Ebene

Diese Impulsverteilung des Heliumions wurde in 9 Schritten von der Stellung der Molekülachse senkrecht zur Richtung des einlaufenden Heliums bis zur Stellung der Molekülachse in der Richtung des einlaufenden Heliums gedreht. In jedem der Schritte wurde dabei ein Bereich an Stellungen der Molekülachse betrachtet, der 10° umfasst, beginnend mit 90° bis 80° , 80° bis 70° u.s.w.

$$\theta = 90^\circ \text{ bis } 80^\circ$$

Im ersten Fall eines Zwischenwinkels θ von 90° bis 80° zwischen einlaufendem Helium und Molekülachse ist die Analogie zum optischen Doppelspalt gegeben. In Impulsverteilung des Heliumions in der x'/y' -Ebene sind deutlich zwei senkrechte Streifen zu erkennen. Allerdings befindet sich um den Nullpunkt des Koordinatensystems ein kreisförmiger Bereich mit einem Radius von 1.6 a.u., in dem sie nicht zu beobachten sind. Die Verteilung in diesem Bereich weist vielmehr eine Ähnlichkeit mit der Beugung an einem Atom auf, nur das hier, da ja auch an beiden Atomen des Moleküls gebeugt werden kann, auch zwei zentrale Beugungsmaxima vorhanden sind. Die Interferenz entstehend durch die kohärente Überlagerung der Reaktion an den verschiedenen Atomen ist innerhalb diese Radius nicht zu beobachten. Ob sie in diesem Bereich nicht stattfindet oder von dem viel stärkeren Effekt der Beugung überlagert wird, ist unklar.

$$\theta = 80^\circ \text{ bis } 70^\circ, 70^\circ \text{ bis } 60^\circ$$

Die beiden Maxima der Beugungsstruktur rücken weiter in die Mitte, das rechte der beiden wird weiter schwächer. Die Interferenzstruktur wandert nach rechts, und von der linken Seite taucht ein weiteres Maximum auf.

$$\theta = 60^\circ \text{ bis } 50^\circ, 50^\circ \text{ bis } 40^\circ$$

Das rechte Maximum wird beginnt zu verschwinden. Das Maximum befindet sich bei etwa $p_{x'He} = 0$. Es wird deutlich breiter.

$$\theta = 40^\circ \text{ bis } 30^\circ, 30^\circ \text{ bis } 20^\circ, 20^\circ \text{ bis } 10^\circ, 10^\circ \text{ bis } 0^\circ$$

Das Maximum wird immer breiter und schließt sich ringförmig. Die Verbreiterung des Streifens während der hier betrachteten Verkleinerung des Zwischenwinkels θ lässt sich einfach aus der Verkleinerung der Spaltbreite verstehen. Der Abstand d der Spalte erscheint durch die schräge Stellung zur Richtung des einlaufenden Heliums um den Faktor $\cos(\theta)$ verkleinert. Ein geringerer Abstand der Spalte erzeugt eine breitere Interferenzstruktur.

Projektion auf x' -Achse für $\theta = 90^\circ$ bis 80°

In Falle einer Stellung der Molekülachse senkrecht Strahlrichtung erhält man durch Projektion auf die $p_{x'He}$ -Achse die gewohnte Darstellung eines Doppelspalt. Es wurden die Struktur in der Mitte, die durch die Beugung am Atom entsteht herausgeschnitten ($r \leq 1.6$ a.u.)

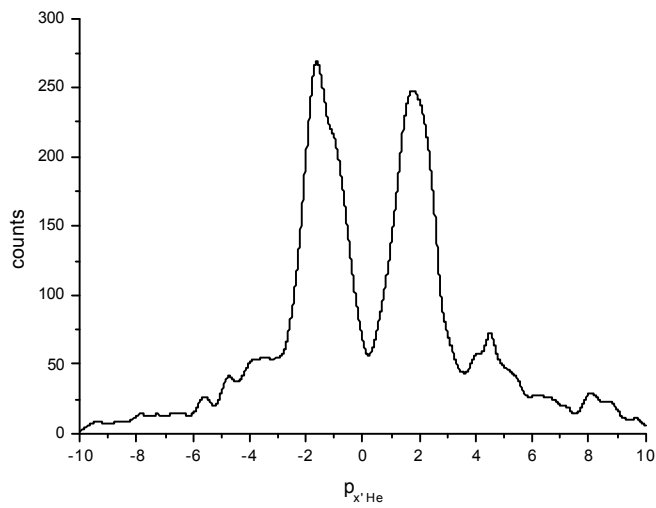


Abbildung 5.16 *KER klein*

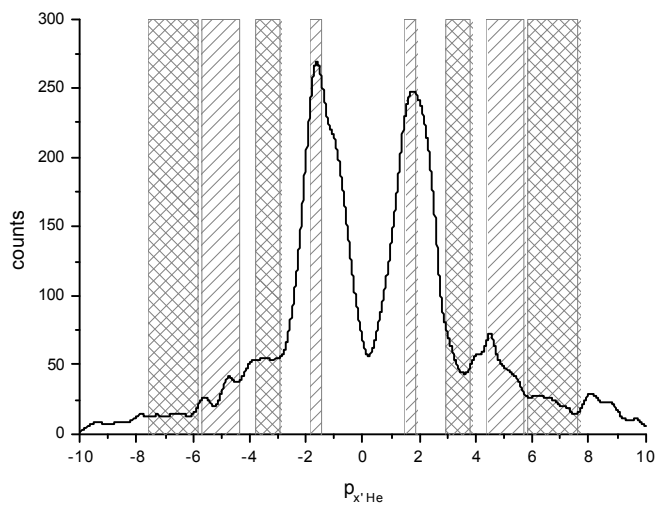


Abbildung 5.17 *KER mittel*

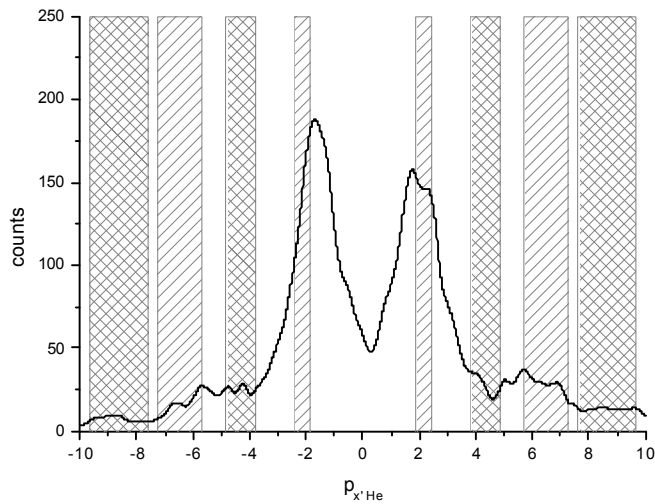


Abbildung 5.18 KER groß

Wählt man einen bestimmten Bereich im KER, so führt das dazu, daß man auch einen bestimmten Bereich von Kernabständen wählt. Damit weist auch die Lage der Maxima und Minima eine gewisse Breite auf. So ist es nach außen hin immer wahrscheinlicher, daß ein Minimum von der einen Seite des KER-Bereiches mit einem Maximum von der anderen Seite des KER-Bereiches zusammenfällt.

Vgl 1. Minimum von KER=2,3 au mit 2.Maximum von KER=0.4 au.

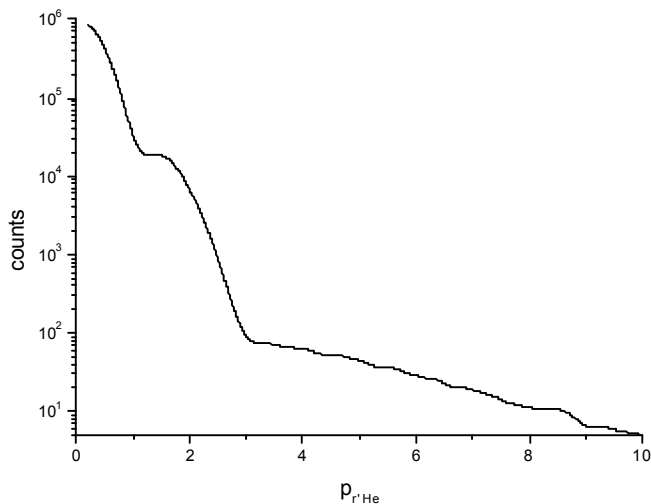


Abbildung 5.19 Beugung am Atom

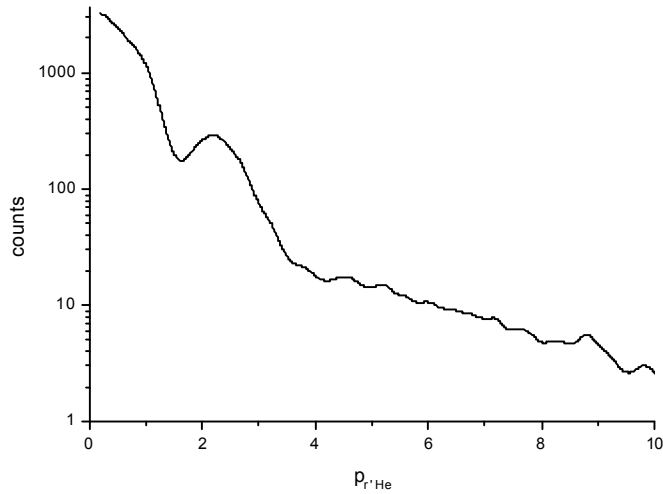


Abbildung 5.20 q 80° bis 90° Bereich 1
 Wie Beugung am Atom, Molekül steht in Strahlrichtung

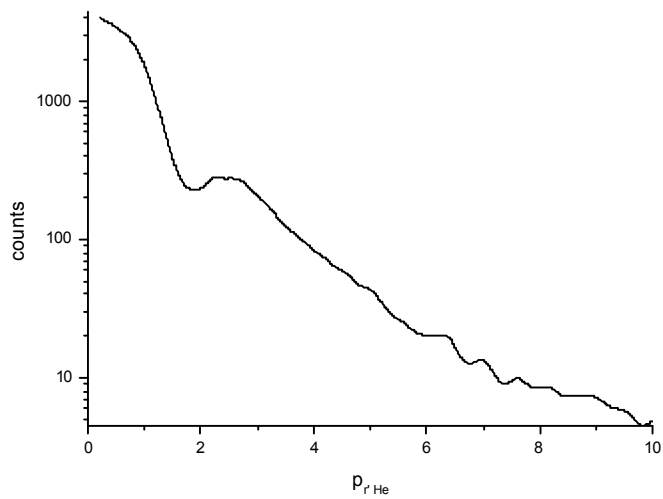


Abbildung 5.21 q 0° bis 10° Bereich 1
 Molekül senkrecht zur Strahlrichtung, die Struktur ist etwas weniger ausgeprägt.
 Insgesamt ist bei Molekülen in allen Orientierungen der Beugungseffekt stärker als beim einzelnen

6 Zusammenfassung und Ausblick

Das im Rahmen dieser Arbeit durchgeführte Experiment hatte zum Ziel Interferenzeffekte beim dissoziativen Ladungstransfer bei Molekülion-Atomstößen zu beobachten.

Interferenzeffekte in Molekül-Atomstößen wurden von McGuire hervorgesagt und berechnet [4]. Diese Arbeit betrachtet ein ähnliches Reaktionssystem. Die von ihm vorausgesagten Effekte wurden bestätigt.

Das Experiment hat es ermöglicht, Interferenzen für alle Molekülorientierungen zu betrachten, womit man leicht Analogien zu zwei speziellen Fällen herstellen kann: mit der Molekülachse senkrecht zur Strahlrichtung entsteht eine Situation ähnlich einem Doppelspalt, bei dem die Kerne des Moleküls als Reaktionszentrum an Stelle der Spalte treten; mit der Molekülachse in Strahlrichtung entsteht eine Situation bei der Streuung an einem einzelnen Atom.

In allen Molekülorientierungen erkennt man ein ringförmiges Minimum bei 1.6 a.u., wie es insbesondere bei der Beugung an einem einzelnen Atom zu beobachten ist. Bei senkrechter Stellung der Molekülachse zur z-Achse überlagert durch die Streifen eines Doppelspalt.

Es war außerdem möglich den Endzustand der Teilchen zu bestimmen, so daß man sagen konnte, ob ein Teilchen angeregt aus der Reaktion hervorgegangen ist oder ob es über metastabile Zwischenzustände zerfallen ist. So ließ sich für den Impulsübertrag von 1.6 au eine Besonderheit feststellen: ein Minimum läßt sich nur im direkten Kanal ohne Anregung beobachten. Findet der Zerfall hingegen über metastabile Zwischenzustände ohne Anregung statt, so weist dieser Kanal bei etwa 1.6 au ein Maximum auf.

Parallel zur Durchführung dieser Arbeit wurden erste Tests mit einem digitalen Oszillographen von Aquiris gemacht. Dieser speichert den Spannungsverlauf der Spannung an den Delaylineanoden. Peaks müssen dann schnell genug erkannt und ausgewertet werden. In der Offlineanalyse wären dann eng nebeneinander oder übereinanderliegende Peaks besser als solche zu erkennen. Diese würde die Totzeitproblematik, die sie durch die Dissoziation eines Moleküls senkrecht zur z-Achse entsteht, erheblich entschärfen.

Anhang

Atomare Einheiten a.u.

Reaktionen in der Atomphysik sind im SI-System oft sehr unhandlich zu beschreiben. Daher wurde das System der atomaren Einheiten entwickelt, in dem grundlegende Naturkonstanten einen einfachen Zahlenwert besitzen.

Elektronenmasse	m_e	$9,1095 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$	1
Elementarladung	e	$1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ As}$	1
Plancksche Konstante	h	$6,62617 \cdot 10^{-34} \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2}$	2 π
	\hbar	$\frac{h}{2\pi}$	1
Lichtgeschwindigkeit (Vakuum)	c	$2,99792 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$	137.036

Ausgehend von diesen Größen ergeben sich für die Umrechnungsfaktoren zwischen den atomaren Einheiten und den SI-Einheiten:

Masse:	$1 \text{ kg} = 1,0978 \cdot 10^{30} \text{ a.u.}$
Länge:	$1 \text{ m} = 1,8897 \cdot 10^{10} \text{ a.u.}$
Zeit:	$1 \text{ s} = 4,1341 \cdot 10^{10} \text{ a.u.}$
Energie:	$1 \text{ J} = 2,294 \cdot 10^{17} \text{ a.u.}$
	$1 \text{ a.u.} = 27,212 \text{ eV}$

Literatur- und Quellenverzeichnis

- [1] Charles E. Mortimer Das Basiswissen der Chemie (1987)
- [2] O. Carnal and J. Mlynek, Phys. Rev. Lett. 66, 2689 (1991)
- [3] T. F. Tuan and E. Gerjuoy, Phys. Rev. 117, 756 (1960)
- [4] J. H. McGuire et al, Phys. Rev. A 38 , 7 (1988)
- [5] Diplomarbeit Jasmin Titze, IKF (2004)
- [6] Atomic Data 2, 119-169 T. E. Sharp (1971)
- [7] Microchannel Plates, Produktbeschreibung, Valvo (1984)
- [8] Sobottka et al
- [9] Doktorarbeit Lothar Schmidt, IKF (2000)
- [10] Diplomarbeit Steffen Runkel, IKF (1998)
- [11] Doktorarbeit Steffen Runkel, IKF (2000)

Danksagung

Mein Dank gilt den beiden Professoren der Arbeitsgruppe Reinhard Dörner und Horst Schmidt-Böcking für die Aufnahme in die Gruppe und Möglichkeit zur Erstellung dieser Diplomarbeit.

Des weiteren danke ich Lothar Schmidt für die Betreuung dieser Arbeit und der Gruppe für die schöne Zeit.